ISSN0386-8257

臨時別冊・数理科学
SGCライブラリ
137

For Senior & Graduate Courses

経路積分と量子解析

量子古典対応から量子現象に迫る

鈴木 増雄 著



サイエンス社

SGCライブラリ-137

経路積分と量子解析

量子古典対応から量子現象に迫る

鈴木 増雄　著

サイエンス社

まえがき

最近の物理学の研究においては，分野横断的な交流によって大きく発展することが多い．物理現象の中でも特に，量子現象は，素粒子や原子分子の領域においては言うに及ばず，広く物質科学から宇宙物理（ブラックホールのエントロピーなど）まで，様々な分野で重要な役割を果たしている．これらの幅広い分野の理論的研究において基本的な概念の一つは，量子古典対応（変換）である．その具体的な数学的処法を与えるのが，本書で取り扱う経路積分と量子解析である．

量子古典対応にも2つの立場がある．一つは，古典系を量子化するディラック–ファインマンの立場である．すなわち，古典的なラグランジアンを用いて経路積分を導入することにより，量子力学的定式化を行うものである．後に詳しく解説するように，ファインマンは古典的な調和振動子のラグランジアンを経路積分表示することにより，ハイゼンベルグの行列力学やシュレーディンガーの波動力学による量子力学と同等な「経路積分による量子力学の定式化」を発見した．

もう一つは，もともと量子的な物理対象系（例えば，スピン系など）を古典変数によって表現される系（いわゆる古典系）に変換するものである．どちらの立場も量子系を経路積分や経路和で表すという点では類似しているが，目的が逆になっている点が大きな違いである．この量子古典対応（ST 変換とも呼ばれている変換）を用いると，量子系の計算機実験が可能となる．この典型的な方法が量子モンテカルロ法である．この方法は，現在多くの物性物理学の分野で用いられている．

本書では，この量子古典対応という概念を主軸にして経路積分と量子解析（非可換な演算子の関数の微分やテイラー展開を扱う数学的方法）を解説する．まず第1章では，本書全体の概要を述べる．第2章では，ファインマンの経路積分法を導入し，量子ゆらぎを表す経路積分と変分原理を議論する．最近まで未解決だった散逸ダイナミクスの変分原理を詳しく解説する．第3章では，非可換系を可換系で表現する量子古典変換（ST 変換）をトロッター公式とその一般化された公式を用いて説明する．これは量子モンテカルロ法の数理の役割を果す．第4章では，手順の分離の数理的手法を与える高次指数分解の一般論を解説する．指数積公式は多くの分野で独立に研究されてきたが，筆者の漸化式による方法は任意の次数まで容易に求まり大変便利であり，ユニークである．第5章では，量子古典対応の数理的基礎となる非可換微分法としての量子解析を詳しく解説する．これはテイラー展開の量子版などを与える．第6章以降では，第5章までの数学的手法の物理への応用を論じる．

本書の基になった連載記事の執筆中，多くの人々との議論を通して啓発された．特に，松枝宏明氏，橋爪洋一郎氏に深く感謝致します．また，編集部の大溝良平氏・平勢耕介氏には多大のご支援を頂きました．

2017 年 8 月

鈴木 増雄

目　次

第 1 章

量子古典対応を基に量子系を視る

1.1 各テーマの概要

1.1.1 「古典力学から量子力学へ」の概略

ニュートンによって確立された古典力学の運動方程式を出発点にして，その系の量子力学的定式化をするファインマンの経路積分の話から始めたい．量子力学の本質は，決定論的古典力学に対して，量子的不確定性（ゆらぎ）の存在にある．この量子的ゆらぎを経路積分によって表現することにより，系を量子化することができる．このアイデアはもとはディラックによる．ファインマンは，このディラックのアイデアに基づいて，量子系の遷移振幅 $Z_{\mathrm{ini,fin}}$ を

$$Z_{\mathrm{ini,fin}} \equiv {}_{\mathrm{fin}}\langle\psi \mid \psi\rangle_{\mathrm{ini}} = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int \mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t))dt\right) D[x(t)] \quad (1.1)$$

のように表した．ただし，$\int \cdots D[x(t)]$ は経路 $\{x = x(t)\}$ に関する「**経路積分**」を表し，$\mathscr{L}$ は古典系のラグランジアン

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - U(x) \quad (1.2)$$

を表す[1,2]．ここで，$U(x)$ は系に働く保存力に対応するポテンシャルエネルギーである．式 (1.1) の遷移振幅（いわば作用）が極値を持つような経路が古典力学の経路となる．そのまわりのゆらぎとして量子効果が記述されることになる．

式 (1.1) を，具体的なポテンシャル $U(x)$ に対して計算するには，半古典近似を使うことが多い[1,2]．

また，式 (1.1) の中の指数関数の肩の時間積分を作用 I とみれば，それを極小とする最小作用の原理となり，この変分原理から，古典的なハミルトン方程式が導かれることはよく知られている通りである[1,2]．

ところで，**散逸のある力学系**，例えば，

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F_{\mathrm{dyn}}(x(t)) = 0 \quad (1.3)$$

を変分原理で導くような変分関数，すなわち散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\text{diss}}$ は今まで見つかっていなかった．その理由は，力学的力 $F_{\text{dyn}}(x(t))$ に対して，散逸力 $-\zeta\dot{x}(t)$ は時間反転に対して，反対称的であり他の項と対称性が異なるからである．無理やり時間依存の因子をつけたりして変分関数を数学的に今までの $x(t)$, $\dot{x}(t)$, t の関数の範囲で求めても物理的な変分原理にはならない[3]．

ところが，最近この難問を筆者は解決することができた[4]．そのアイデアは，輸送現象（定常状態）の変分原理を久保の線形応答[5]から非線形応答[6]に拡張する際に導入された「瞬間のエントロピー生成・散逸ではなく，プロセス全体（過去から問題とする時刻まで）を考慮すること」という新しい視点より生まれた．すなわち，厳密には第 2.2.3 項で記述するが，運動方程式 (1.3) を導く散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\text{diss}}$ は物理的におおむね

$$\mathscr{L}_{\text{diss}} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - U(x) - \int_{\substack{x(0)\\ \text{(path)}}}^{x(t)} \zeta\dot{x}(t'(x'))dx' \tag{1.4}$$

で与えられることがわかった[4]．ここで，$U(x)$ は $\partial U(x)/\partial x = -F_{\text{dyn}}(x)$ を充たす力学的ポテンシャルである．新しい点は式 (1.4) の右辺の最後の項が過去の経路に依る積分になっていることである．ただし，$t(x)$ は $x = x(t)$ の逆関数であり，多価関数になるので経路を指定しないと一意的に決まらず，上の積分はこの意味で経路に依存することになる．この点が全く新しい．

1.1.2 「量子古典対応」の概略

前節でも述べた通り，この概念は古くディラックやファインマンにまで遡ることができる．彼らは古典系から出発して，それに対応する量子系を記述する形式として経路積分表示に到達した．一方，統計物理学の分野では，元来量子力学的な系を古典表示して取り扱い易くする方法が提唱された[7~11]．量子系が古典系に等価になるといっても，それは，決して通常の有限の値を持つ短距離力で記述される古典系ではない．それは，後で説明する「量子軸」方向のサイズと共に発散するような特異な力を持つ．また，その相互作用の対称性も通常のものとは異なり，元の量子相互作用に由来する新しい型の対称性になる．これらの特徴は，量子古典対応に共通な本質である．本書では触れないが，AdS/CFT 対応では，重力という（示量性でない）長距離力を持つ反ド・ジッター（Anti-de Sitter; AdS）宇宙と共形場理論（Conformal Field Theory; CFT）との対応になっている[8]．

統計力学の量子模型の典型的な例は，量子ハイゼンベルグ模型であり，次のように $O(3)$ 対称性を持つ 2 体力のハミルトニアンで与えられる：

$$\mathscr{H} = -\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j. \tag{1.5}$$

この量子スピン系を，古典的な変数（可換な変数，すなわちアーベリアン）で

あるイジングスピン（$S_i = \pm 1$）を用いて表すと，対称性の高い4体力イジング模型となる[7]．しかも，d 次元量子スピンは $(d+1)$ 次元イジング模型で表され，新たに追加された1次元方向は「量子軸」または「トロッター軸」（筆者が最初に名づけた）と呼ばれている．この方向の相互作用は，「トロッター数」（トロッター軸方向の長さ）を大きくすると共に無限大になる特異な相互作用であることを注意しておきたい．

このように，特異な相互作用を持つ古典系になっても，相互作用が可換であることは大きな利点・強みである．実際，この変換された系は計算機実験（シミュレーション）で研究することができる．その代表がモンテカルロ法による研究方法である．これは「量子モンテカルロ法」と呼ばれ，多くの分野で盛んに利用されている[7,14]．

以上の量子古典対応の背後にあるのは，互いに非可換な演算子 A, B に対する，次のいわゆる**トロッター公式**

$$e^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty} (e^{\frac{xA}{n}} e^{\frac{xB}{n}})^n \tag{1.6}$$

である．この公式は，演算子 A, B が有限行列のようにノルムが有界な場合には問題なく利用できるが，非有界の場合には難しい数学的研究（ノルム収束ではなく，弱収束など）の対象となる[15,16]．ここでは，そういう数学的問題は避けノルム有界な演算子を対象にして物理に応用することにする．

数学者が公式 (1.6) を利用するときは，A, B の対称性から $\exp(x(A+B))$ の対称性などを導くために使うので，厳密な収束証明や演算子の範囲（ドメイン）を気にしなければならない．しかし，物理の問題に応用する際は，**トロッター数** n は大きいが有限の場合であり，むしろ，公式そのものの近似の度合のほうが重要である．

そこで，以下では，オイラー的に形式的な公式に着目して，近似の度合を上げる最近の研究成果[16]の概略を，紹介することにしよう．

まず，最低近似の公式は，よく知られているように，

$$e^{x(A+B)} = \left(e^{\frac{xA}{n}} e^{\frac{xB}{n}}\right)^n + O\left(\frac{x^2}{n}\right) \tag{1.7}$$

である．次に，右辺の2つの積を対称化すると，1次だけ近似の程度が上がって

$$e^{x(A+B)} = \left(e^{\frac{xA}{2n}} e^{\frac{xB}{n}} e^{\frac{xA}{2n}}\right)^n + O\left(\frac{x^3}{n^2}\right). \tag{1.8}$$

同様にして，任意次数の近似公式が漸化的に作られている[17]．上の公式を正規直交系で挟んで対角成分の和を取れば，量子系の状態和が古典系の状態和で表されることになる[7]．この状態和から系のエントロピーなどが求められる．

1.1.3 「量子解析—非可換微分法」の概略

量子力学の理論形式は非可換な演算子で表現されることに特徴がある．2つ

の非可換な演算子の観測値を同時に確定することはできず，不確定性関係が現れる．

このような非可換な演算子 A, B に対して，関数 $f(A+B)$ を演算子 B で展開する必要に迫られることが多い．通常の c-数（可換な数）x, y に対しては通常のテイラー展開

$$f(x+y) = f(x) + f^{(1)}(x)y + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(x)y^n + \cdots \tag{1.9}$$

が成り立つことはよく知られている（ここで，$f^{(n)}(x)$ は $f(x)$ の n 階微分である）．これを非可換な演算子 A, B の関数 $f(A+B)$ に拡張して筆者は式 (1.9) の量子版を作った．それらがこれからアイデアだけ説明する「量子解析」である[12,13]．演算子 A, B が互いに可換な場合にはもちろん

$$f(A+B) = f(A) + f^{(1)}(A)B + \cdots + \frac{1}{n!}f^{(n)}(A)B^n + \cdots \tag{1.10}$$

が成り立ち，$f^{(n)}(A)B^n$ は単に 2 つの演算子 $f^{(n)}(A)$ と B^n の積である．ところが，A と B が非可換な場合には，事情は全く変わってしまう．量子古典対応という観点で話を進めたいので，形式的には式 (1.9) のテイラー展開と同形にして，その中味は量子的に拡張することにする．そこで，演算子を他の演算子に変換する「**超演算子**」を用いて，演算子 A の関数 $f(A)$ の A に関する「微分超演算子 $df(A)/dA$」を次のように導入する：

$$\frac{df(A)}{dA} = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)dt = \frac{f(A) - f(A-\delta_A)}{\delta_A} = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A}. \tag{1.11}$$

ただし，δ_A は $\delta_A B \equiv [A, B]$ で定義される超演算子（通常，**内部微分**と呼ばれる）．式 (1.11) の中の A は左から A をかけて積を作る超演算子と解釈する．こうすると，A と δ_A は互いに可換な超演算子となる：

$$(A\delta_A)B = (\delta_A A)B = A[A, B]. \tag{1.12}$$

この A と δ_A の可換性のために，式 (1.11) の t 積分も 3 つ目の分数式も意味を持つのである（ちなみに，δ_A の逆 δ_A^{-1} は存在しないが，$f(A) - f(A-\delta_A)$ は δ_A に比例するので δ_A で割ることが可能となる）．超演算子の差分の比で表された式 (1.11) を「**量子微分**」と呼ぶ．この量子解析の定式化では，量子古典対応が明確である．すなわち，A と B が可換な場合には，δ_A は零超演算子とみなすことができ，式 (1.11) は古典微分 $f^{(1)}(A)$ に帰着する．

同様にして，**高階量子微分** $d^n f(A)/dA^n$ も定義できて，これを $f^{(n)}(A)$ の代わりに用いると，一般的な量子テイラー展開公式が証明できる[12,13]．

この量子微分を用いると，指数演算子 $\exp(A+xB)$ や対数演算子 $\log(A+xB)$ のパラメータ x に関する展開が可能となる[12,13]．こうして，BCH 公式の一般項やその他多くの非可換公式を具体的に容易に導けることになった[12,13]．

また，行列を成分に持つ行列（大行列）や行列式（準行列式）も同様に扱う

ことができる．

1.1.4 「統計物理学と量子解析」の概略

量子解析は非平衡統計力学を扱う際には極めて有効である．**フォン・ノイマン方程式**から，密度行列 $\rho(t)$ の任意の関数 $f(\rho(t))$ が再びフォン・ノイマン方程式と同形の方程式

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))] \tag{1.13}$$

を充たすことが公式 (1.11) を用いると容易に示せる．式 (1.13) は量子エントロピーや量子エンタングルメントを議論する際に役に立つ．また，線形応答理論[5]におけるエントロピー生成と不可逆性を導く際にも，非線形輸送現象の解析の場合にも，量子解析は便利である[6]．

さらに，統計力学を場の理論形成で扱う熱場ダイナミクスを定式化する際には，$\rho(t)^{1/2}$ を扱うので，やはり量子解析で導かれる公式 (1.13) は重要である[18]．

1.1.5 「物性物理・量子情報の基礎的問題への応用」の概略

物性物理学の研究分野はあまりにも広大であり，その中の基礎的問題に絞っても，超伝導，超流動，近藤効果，乱れと局在現象，スピングラスと情報理論，… ときりがないほど多い．ここでは，(a) レゲットらの巨視的量子トンネル効果の経路積分による取扱い，(b) 量子エンタングルメントと熱場ダイナミクスなどについて議論する．ここでも経路積分の方法が重要な役割を果たす．

1.1.6 「確率過程と経路積分・量子解析」の概略

熱的ゆらぎと量子ゆらぎは形式的には類似しているところがあり，そこに着目すると数学的には確率過程も量子力学も経路積分を用いて共通の取扱いが可能となる．実際，確率微分方程式の解を集団（アンサンブル）として捉えると，確率変数 x が時刻 t でとる確率 $P(x,t)$ を扱うことになる．それを記述する偏微分方程式がフォッカー・プランク方程式である．これを適当に変換すると，虚時間に対するハミルトニアン定式化が得られる．これも一つの古典量子対応と形式的にはみなせる．このように，確率過程を代数的に表現し，発展演算子を指数演算子で表すと，量子解析の処法が使えるので見通しがよくなる．

例えば，図 1.1 に示される不安定点からの非線形緩和，すなわち秩序生成の理論[19]はその後のいろいろな分野での類似の理論のプロトタイプとみることができる．図に示されたポテンシャル $U(x)$ に対応する力 $-\partial U(x)/\partial x$ の他にランダムな力（ノイズ）$\eta(t)$ が働いている系の運動方程式（**非線形ランジュバン方程式**）は

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{\partial}{\partial x}U(x) + \eta(t) \tag{1.14}$$

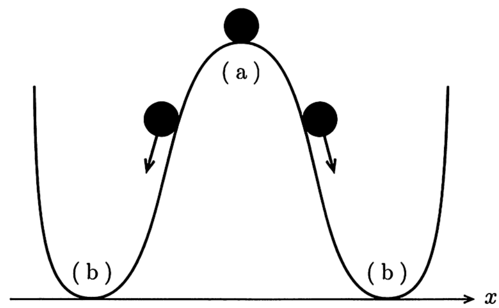


図 1.1　不安定点 (a) から安定点 (b) への緩和，または秩序生成（文献 11) より）.

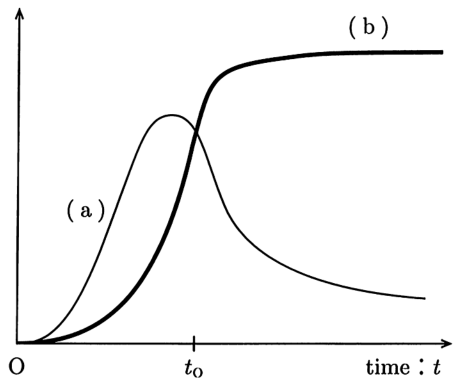


図 1.2　ミクロなゆらぎがオンセットタイム t_O 近傍で指数関数的に増大し，巨視的秩序が形成される[18]. (a) ゆらぎ，(b) 秩序パラメータ.

と与えられる．この一見簡単に見える確率微分方程式でも，今のところ厳密解は求まっていない．しかし，物理的に本質的な領域，すなわち，秩序生成領域（オンセットタイムの近傍）の振舞いを充分良く記述する解は発見されている．それは「秩序生成のスケーリング解」と呼ばれている[18]．その定性的な振舞いは図 1.2 に示されている通りである．すなわち，オンセットタイム t_O の近傍でミクロなゆらぎが指数関数的に大きく増大し，巨視的秩序が形成される[19]．この解法といろいろな物理現象への応用については後の章で詳しく説明する．

1.1.7 「確率過程量子化の方法—量子古典対応から古典量子対応へ」の概略

古典系から出発して量子化するもう一つの方法がパリジとウーによって提唱された「確率過程量子化の方法」である[20,21]．確率微分方程式の中のノイズの大きさを，プランク定数を用いて量子効果をちょうど与えるように設定する．この方法は量子系（場の理論）を計算機実験するのに便利である．この方法は，彼ら著者たちも論文で指摘しているように，これは，ST 変換で量子スピン系を古典系に変換して計算機実験する量子モンテカルロ法と共通するアイデアに基づいている．

いずれにしても，多くの分野で量子古典変換の概念が広く普及しつつあるこ

とは喜ばしい限りである．

参考文献

1) R.P. ファインマン/A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，『ファインマン経路積分と量子力学』（マグロウヒル出版，1990）．
2) 大貫義郎，柏太郎，鈴木増雄，『経路積分の方法』（岩波書店，2000）．
3) 大貫義郎，『力学』（岩波書店，1994）第 1 章 43 頁の解説参照．
4) M. Suzuki, *Physica A*392, 4279 (2013), APPC/2 プロシーデングス，and to be submitted to *Physica A*.
5) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
6) M. Suzuki, *Physica A***390**, 1904 (2011); ibid. *A***391**, 1074 (2012); ibid. *A***392**, 314 (2013).
7) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
8) J.M. Maldacena, *Adv. Theor. Math. Phys.* **2**, 231 (1998).
9) 松枝宏明，『量子系のエンタングルメントと幾何学　ホログラフィー原理に基づく異分野横断の数理』（森北出版，2016）．
10) B.K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models* (Springer, 1996). および，S. Suzuki, J. Inoue and B.K. Chakrabarti, 同名の書, Second Edition.
11) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
12) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997). この論文で初めて「quantum analysis」（量子解析）という造語を筆者は導入した．すでに，交換関係を用いた非可換演算子の代数的計算法を表す「quantum calculus」という言葉はあるが，これには，量子微分法などの解析的概念は含まれていない．
13) T.L. Chow 著，鈴木増雄，香取眞理，羽田野直道，野々村禎彦共訳，『科学技術者のための数学ハンドブック』（朝倉書店，2002）訳注．
14) M. Suzuki (ed.), *Quantum Monte Carlo Methods in Condensed Matter Physics.* (World Scientific, Singapore, 1993), およびその中の引用文献．
15) T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer, 第 2 版 (1976).
16) K. Aomoto, On a unitary version of Suzuki's exponential product formula, *J. Math. Soc. Japan* vol.**48**, No.3, 693 (1996).
17) M. Suzuki, *Phys. Lett. A***146**, 319 (1990); id. *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991).
18) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Japan* **54**, 4483 (1985); id. *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998); Y. Hashizume and M. Suzuki, *Physica A***362**, 3518 (2013).
19) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77 & 477 (1976); id. **57**, 380 (1977); id. *Suppl.* **64**, 402 (1978); id. *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195 (1981); id. *Int. J. Mod. Phys. B***26**, 1250001 (2012).
20) G. Parisi and Y.S. Wu, *Scientific Sinica* **24**, 483 (1981).
21) M. Namiki, *Stochastic Quantization* (Springer, 1992).

第 2 章
古典力学から量子力学へ

2.1 変分原理，ラグランジアンおよび経路積分量子化

量子力学と古典力学との関係を議論する際には，2 つの立場が考えられる．一つは，ミクロでも成り立つ量子力学から出発して，不確定性が効かない（すなわち，プランク定数 $\hbar \to 0$ の）極限として，古典力学を捉える立場である．これは大変論理的で正統派の立場である．もう一つは，マクロな系で成り立つ古典力学という極めて直観的でわかり易い定式化から出発して，量子効果の入った定式化へと進化・発展させる立場である．経路積分による量子力学の定式化は，後者の立場である．その元祖はディラックである[1]．彼は，古典力学のラグランジアン $\mathscr{L}(x(t), \dot{x}(t), t)(\equiv \mathscr{L}(t))$ を時間積分した作用 S を指数の肩に乗せた量

$$\exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \mathscr{L}(t)dt\right\} = \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a})\right\} = B(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) \tag{2.1}$$

が，2 つの時刻 t_a，t_b の状態の間の遷移確率に “対応する” ことを見抜いた[1,2]．ファインマンは，さらに，この “対応関係” を厳密な定式化へと発展させ，経路積分量子化の方法を発見した[2,3]．

2.1.1 ファインマンの経路積分のアイデア：大局的な捉え方[4,5]

ファインマンの経路積分は，式 (2.1) を始点 $x(t_\mathrm{a})$ と終点 $x(t_\mathrm{b})$ を固定したあらゆる経路について和をとったものであり，記号として

$$Z_{\mathrm{ini,fin}} = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \mathscr{L}(x(t), \dot{x}(t), t)\right\} D[x(t)] \tag{2.2}$$

と書かれる[6~8]．ただし，$\mathscr{L}$ はハミルトニアン $\mathscr{H}$ から，$\mathscr{L} = p\dot{x} - \mathscr{H}$ というルジャンドル変換で与えられる．

この定式化は通常のシュレーディンガーの波動方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t} = \mathscr{H}\psi(x,t); \quad \mathscr{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x) \tag{2.3}$$

による量子力学の定式化と比べて大きな特徴を持っている．それは，式 (2.3) が "微分" という局所的概念を用いて表現されているのに対して，式 (2.2) は "積分" という大局的概念を用いて表現されていることである．この違いは，単に形式的なもの（微分と積分は互いに逆演算であること）ではなく，自然法則の捉え方の違いを与える極めて根の深いものであると思われる．実際，ニュートンの古典力学は

$$m\ddot{x}(t) = 力 \left(= F(x(t)) \equiv -\frac{dV(x)}{dx} \right) \tag{2.4}$$

という微分方程式で表され，それを数学的に発展させて整理した解析力学のハミルトン・ヤコビ方程式

$$\mathscr{H}\left(x, \frac{\partial S}{\partial t}, t\right) + \frac{\partial S(x,t)}{\partial t} = 0 \tag{2.5}$$

で記述することもできる．ここで，

$$\psi(x,t) = \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}S(x,t)\right) \tag{2.6}$$

とおくと，容易に式 (2.5) は，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\psi}\left(\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2 + V(x)\psi \tag{2.7}$$

と変形できる[8]．シュレーディンガー方程式 (2.3) と古典的表式 (2.7) は良く似ている．ただし，古典力学の非線形の部分 $(\partial\psi/\partial x)^2/\psi$ を，2 階の線形微分演算式 $\partial^2\psi/\partial x^2$ に置き換えて量子力学の基礎方程式としたところがシュレーディンガーの卓見である．この例では，参考にした方程式よりも，より簡単で美しい方程式が真の物理法則を表しており，まことに見事である．このように，局所的な捉え方では，法則を表す方程式が直接的に発見されることがあり，最初に法則を発見するのに，この局所的な捉え方は大変有効である．

それに対して，変分原理やそれと関連する経路積分は物理法則を大局的に捉える見方であり，法則自体を初めて見つけるというよりは，むしろ物理法則をより深く統一的に理解するのに適した物理の理論である．言い換えると，物理法則を大局的に捉える方向性が物理的直観で見えてきて，調和振動子のような簡単な系でそのアイデアが正しいことがわかっても，それを一般化したり，数学的に厳密に定式化するのは容易でないということである．

実際に，ファインマンのような天才的な理論物理学者でも，大学院生のときに思いついた経路積分量子化の方法を発展させるのに時間を要したようである[2,3]．思うに，ファインマンはハイスクールの物理教師の一言で，物理法則の大局的見方に目覚めたのかもしれない[4]．ニュートンの法則を用いて粒子の運動を説明する教師の講義に退屈していたファインマンを見た先生は，「ファインマン君，この問題を変分原理を用いて扱ってみなさい．」と物理の深い捉え方のあ

ることを教えた．それ以来，ファインマンは，物理が前より一層面白い学科目になったと述懐している．若いときに良き師に出会うことがいかに大切かを如実に表している例かとつくづく思う．読者の中にも思い当たる人が多いのではないだろうか．筆者も，恩師の久保亮五先生，M.E. Fisher 先生，I. Prigogine 先生たちとの出会いの影響を受けて物理探究の強い意欲を今なお持ち続けている．例えば，散逸系のダイナミクスを変分原理で表す散逸ラグランジアンを見つけ，それを用いて散逸系の経路積分量子化を定式化することに現在没頭している．散逸系の特徴は熱の発生とエントロピー増大であるから，散逸ラグランジアンは熱の発生の項が含まれているはずであると数年前から見当はついていた．しかし，それをどのように定式化するか，どのように変分を実行してオイラー・ラグランジュ方程式に相当する粘性抵抗を持った（散逸のある）運動方程式を導くか，その数学的処法が見つからず，四苦八苦していた．最近やっとこの長年の難問を解決することができた[9~11]．これについては，次節に詳しく解説する予定である．

2.1.2　経路積分と変分原理

解析力学[12]でよく知られているように，古典力学にしたがう運動の軌道は，式 (2.1) で定義される作用 $S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a})$ を極小にする変分原理[5, 6, 13]で与えられる．極値を決める条件としての**オイラー・ラグランジュ方程式**

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \dot{x}}\right) - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial x} = 0 \tag{2.8}$$

が系の運動方程式 "$m\ddot{x}(t) = $ 力" を与える（逆に，そうなるようにラグランジアンを定義する）．したがって，古典力学の運動方程式の解 $x = x_\mathrm{cl}(t)$ に対する作用は極小または停留値となり，式 (2.1) の指数関数の振動が少なく全体として一番大きな値を持つ．図 2.1 に示すように，古典解のまわりの（オフシェルの）軌道もそれなりに作用 S に寄与する．それらが量子的なゆらぎの効果を与える．

実際に，式 (2.2) は

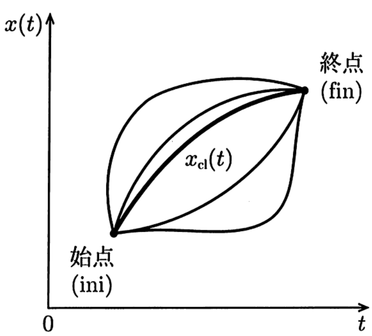


図 2.1　古典解 $x_\mathrm{cl}(t)$ とそのまわりのさまざまな経路．

$$Z_{\rm ini,fin} = \cos\left(\frac{1}{\hbar}S(t_{\rm b},t_{\rm a})\right) + {\rm i}\sin\left(\frac{1}{\hbar}S(t_{\rm b},t_{\rm a})\right) \tag{2.9}$$

と変形できるので，作用 $S(t_{\rm b},t_{\rm a})$ がプランク定数 $\hbar$ より大きくなると，それらの実部も虚部も激しく正負に振動するようになり，和をとると互いに打ち消し合って $Z_{\rm ini,fin}$ に効かなくなる．すなわち，作用 $S(t_{\rm b},t_{\rm a})$ に対する変分原理を満たす古典解が一番大きな寄与をする．

このように，変分原理は経路積分量子化の概念的な出発点となっている．

2.1.3　簡単な系で経路積分量子化の特徴を捉える

物理の本質は簡単な典型例で理解できることが多い．経路積分の方法も 1 次元調和振動子の場合について説明するとわかり易い[3,5,8]．この系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は

$$\mathscr{H} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 + \frac{1}{2}kx(t)^2 \equiv \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}kx(t)^2 \tag{2.10}$$

の形に書けるから，それをルジャンドル変換して得られるラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ は

$$\mathscr{L}(t) = p\dot{x} - \mathscr{H} = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2 - \frac{1}{2}kx(t)^2 \tag{2.11}$$

となる．ここで，m は振動子の質量，k はバネ定数である．したがって，この古典系としての固有振動数 ω は $\omega = (k/m)^{1/2}$ で与えられる．

始点 $(x_{\rm a}, t_{\rm a})$ と終点 $(x_{\rm b}, t_{\rm b})$ を固定して解いた運動方程式 $m\ddot{x}(t) + kx(t) = 0$ の古典解は

$$x_{\rm cl}(t) = \frac{x_{\rm b}\sin(\omega(t-t_{\rm a})) - x_{\rm a}\sin(\omega(t-t_{\rm b}))}{\sin(\omega(t_{\rm b}-t_{\rm a}))} \tag{2.12}$$

で与えられる．この古典解に対応する作用 $S_{\rm cl}(t_{\rm b},t_{\rm a})$ は

$$S_{\rm cl}(t_{\rm b},t_{\rm a}) = \frac{m\omega}{2\sin(\omega(t_{\rm b}-t_{\rm a}))}\left[\left(x_{\rm a}^2 + x_{\rm b}^2\right)\cos(\omega(t_{\rm b}-t_{\rm a})) - 2x_{\rm a}x_{\rm b}\right] \tag{2.13}$$

となる[3]．この古典的な作用を用いて，調和振動子の量子振幅の古典近似

$$Z_{\rm ini,fin}^{\rm (cl)} = \exp\left[\frac{\rm i}{\hbar}S_{\rm cl}(t_{\rm b},t_{\rm a})\right] \tag{2.14}$$

が得られる．

この物理的意味を理解するために，バネ定数 k を零（すなわち $\omega = 0$）と，より簡単にしてみる．こうして，自由粒子に対する古典近似式

$$Z_{\rm ini,fin}^{\rm (cl,free)} = \exp\left(\frac{{\rm i}m(x_{\rm b}-x_{\rm a})^2}{2\hbar(t_{\rm b}-t_{\rm a})}\right) \tag{2.15}$$

が得られる．すなわち，自由粒子の古典近似の振幅は拡散型のゆらぎを示し，その分散（広がり）は $\hbar(t_{\rm b}-t_{\rm a})$ に比例する．これは，量子ゆらぎの確率的側面

を表している．

さらに，終点 $(x_\mathrm{b}, t_\mathrm{b})$ を変数と見て (x, t) と表し，規格化した振幅を $\psi(x, t)$ と書くと，これは，

$$\psi(x,t) = \left(\frac{m}{2\pi \mathrm{i}\hbar(t-t_\mathrm{a})}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{\mathrm{i}m(x-x_\mathrm{a})^2}{2\hbar(t-t_\mathrm{a})}\right) \tag{2.16}$$

となる．したがって，この $\psi(x, t)$ は次の偏微分方程式を満たす：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t). \tag{2.17}$$

これは，自由粒子のシュレーディンガー方程式に他ならない．

同様にして，式 (2.10) で記述される（$k \neq 0$ の）調和振動子の場合（式 (2.10)）にも，古典解 (2.12) に対する作用 (2.13) に基づく振幅 (2.14) は，$t_b = t$, $x_b = x$ と書き直した変数を用いて，シュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{1}{2}kx^2\right)\psi(x,t) \tag{2.18}$$

を満たすことがわかる．

古典解という経路の一部だけを用いた振幅が厳密にシュレーディンガー方程式を満たすのは，ポテンシャル $V(x)$ が x の 2 次式（$V(x) = \frac{1}{2}kx^2 + (1\text{ 次式})$）で表される場合の特殊性による[3]．それは，他の経路についても，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-a(x_1-x)^2 - b(x-x_2)^2\right] dx = \left(\frac{\pi}{a+b}\right)^{1/2} \exp\left[-\frac{(x_1-x_2)^2}{a^{-1}+b^{-1}}\right] \tag{2.19}$$

を用いて計算すると，数因子を除いて，古典近似と同じ式になることから容易に理解できる．ポテンシャルが 2 次式で表される系は，力が線形であるため，古典的にも加法性が成り立ち，量子力学の基礎方程式の線形性が見え易い情況になっていると言える．この意味で，ファインマンが最初に調和振動子の経路積分表示に目をつけたことは，我々が新しい物理の理論を開拓する際の手本となるであろう．

ガウスが誤差論で見つけたガウス分布，すなわち 2 次式の指数関数は，上の式 (2.19) のようにコンボリューションをとっても同形になったり，積分が円の面積を表すのに使われる超越数 π と関係したり，いろいろ美しい性質を持っている．

2.1.4 変分原理におけるラグランジアンの物理的意味

(i) 一般的考察

前項までの議論において，変分原理が重要な役割を果たすことが示された．しかも，系のハミルトニアンではなく，それからルジャンドル変換で導かれるラグランジアンが変分関数の働きをしてきた．数学的には，作用

$$S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) = \int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \mathscr{L}(t)dt \tag{2.20}$$

が極小また停留値となるという変分条件（オイラー・ラグランジュ方程式）(2.8) から系の運動方程式が得られれば，$\mathscr{L}(t)$ は何でもよいという見方もある．しかし，物理法則を統一的に深く理解する理論として変分原理を捉える立場に立てば，ラグランジアンが物理的に意味のあるものとして解釈できるのが望ましいであろう．実際，運動方程式を変分原理の解として与える変分の被積分関数は一意的には決まらない．すなわち，この逆問題の解は多数存在する．可逆な力学の場合は，通常，

$$\mathscr{L}(t) = T - V; \quad T = \frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2, V = V(x(t)) \tag{2.21}$$

で与えられるラグランジアンを変分の被積分関数として用いる．しかし，次節で述べるように，散逸力学系では，数学的に単に逆問題として解いた変分の被積分関数が物理的なものであるとは限らない[9~11]．そこで，散逸系の変分原理という長年の難問に対して，"物理的" ラグランジアンを探す指針となるように，ラグランジアン $\mathscr{L}$ の物理的意味・役割を詳しく議論しておこう．

簡単のために，ハミルトニアン $\mathscr{H}$ が時間によらない場合を考える．すなわち，$\mathscr{H} = T + V = E$ (一定) とする．ここで，保存力の場合には，$V = V(x)$ は力 $F(x)$ を用いて

$$V(x) = -\int_{x_0}^{x} F(x')dx' + E \tag{2.22}$$

の形に書ける．ただし，ポテンシャル V の基準を $x = x_0$ のとき $V = E$ にとった．当然のことながら，エネルギー保存則 $\mathscr{H} = E$ を時間 t で微分すると式

$$(m\ddot{x}_\mathrm{cl}(t) - F(x_\mathrm{cl}(t)))\dot{x}_\mathrm{cl}(t) = 0 \tag{2.23}$$

となる．

要するに，運動方程式の解 $x_\mathrm{cl}(t)$ とは限らない任意の関数 $x(t)$ に対して，積分

$$\hat{S}(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) = \int_{t_\mathrm{a}}^{t_\mathrm{b}} \left(T(\dot{x}(t)) + \int_{x_0}^{x(t)} F(x)dx \right) dt \equiv S_T + S_W \tag{2.24}$$

を考えると，式 (2.22) などから，これは

$$\hat{S}(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) = S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a}) + E \cdot (t_\mathrm{b} - t_\mathrm{a}) \tag{2.25}$$

となり，作用 $S(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a})$ を極小にする問題は，式 (2.24) で定義される $\hat{S}(t_\mathrm{b}, t_\mathrm{a})$ の極小，停留値問題に帰着する．したがって，ラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ の時間積分である作用 S の変分問題は，力が粒子になした仕事による作用 S_W と運動エネルギーによる作用 S_T とがつり合ったときに実際の古典軌道 $x = x_\mathrm{cl}(t)$ が実現されることを示している．

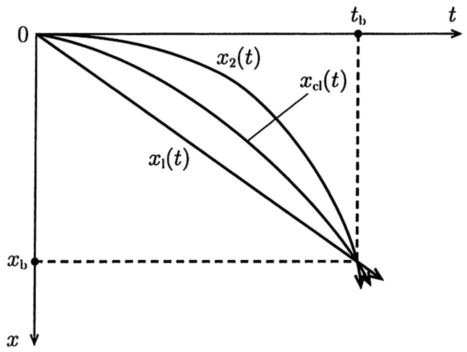


図 2.2　自然落下運動 $x_{cl}(t) = \frac{1}{2}gt^2$ と変分関数 $x_l(t) = (x_b/t_b)t$ および $x_2(t) = at^2 + bt : bt_b = x_b - at_b^2$.

この解釈を拡張して散逸力学系の散逸ラグランジアンを発見することに筆者は最近成功した[9~11].

(ii) 自然落下運動を例にラグランジアンの物理的意味を再考する

上で一般的に説明した内容を図 2.2 のような自然落下運動を例にして具体的に説明し，ラグランジアンを用いた変分原理の直観的な理解を深めたい．

ii-a) 古典解の作用

まず古典解 $x = x_{cl}(t) = \frac{1}{2}gt^2$ に対する作用 $S^{(cl)} = S_T^{(cl)} + S_W^{(cl)}$ を求めると，

$$S_T^{(cl)} = \frac{m}{2}\int_0^{t_b} \dot{x}(t)^2 dt = \frac{1}{6}mg^2t_b^3, \tag{2.26}$$

および

$$S_W^{(cl)} = \int_0^{t_b} (-V(x(t)))dt = mg\int_0^{t_b} x_{cl}(t)dt = \frac{1}{6}mg^2t_b^3 \tag{2.27}$$

となり，2 つの作用 $S_T^{(cl)}$ と $S_W^{(cl)}$ とは予想通り，古典解 $x = x_{cl}(t)$ に対しては一致している：$S_T^{(cl)} = S_W^{(cl)}$,　$S^{(cl)} = S_T^{(cl)} + S_W^{(cl)} = \frac{1}{3}mg^2t_b^3$.

ii-b) 線形の変分関数 $x_l(t) = (x_b/t_b)t$ に対する作用

線形の変分関数の作用 S_T と S_W を求めると，$S_T^{(l)} = \frac{1}{8}mg^2t_b^3$，および $S_W^{(l)} = \frac{1}{4}mg^2t_b^3$ となり，$S_T^{(l)} < S_W^{(l)}$（すなわち，$S_T^{(l)} \neq S_W^{(l)}$）および $S^{(l)} \equiv S_T^{(l)} + S_W^{(l)} = \frac{3}{8}mg^2t_b^3 > S^{(cl)}$ の不等式が予想通り成り立っている．

ii-c) 古典解を含む一般の 2 次曲線に対する作用

一般の 2 次変分関数 $x(t) = at^2 + bt$ に対する 2 つの作用 $S_T(a)$ と $S_W(a)$ は，$b = (x_b - at_b^2)/t_b$ として，

$$S_T(a) = \frac{m}{2}\int_0^{t_b} \dot{x}(t)^2 dt = \left(\frac{a^2}{6} + \frac{g^2}{8}\right)mt_b^3, \tag{2.28}$$

および

$$S_W(a) = \int_0^{t_b} (-V(x(t)))dt = \left(-\frac{ag}{6} + \frac{g^2}{4}\right)mt_b^3 \tag{2.29}$$

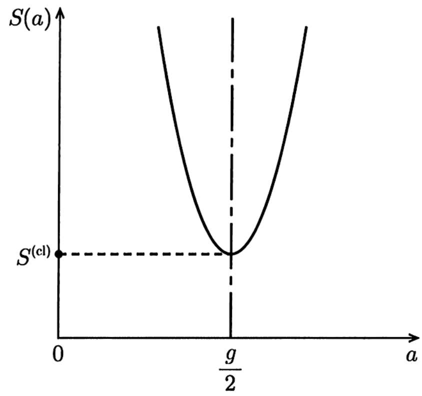


図 2.3 作用の曲率依存性（a-依存性）．$x(t) = at^2 + bt$ の曲率 κ は $\kappa = 2a/\left\{1+(2at+b)^2\right\}^{3/2}$ で与えられる．$S(a)$ は，$a = \frac{1}{2}g$ のとき，最小値 $S^{(\mathrm{cl})}$ をとる．

と与えられる．よって，任意の a に対する作用 $S(a) = S_T(a) + S_W(a)$ は，

$$S(a) = \left(\frac{1}{6}\left(a - \frac{g}{2}\right)^2 + \frac{1}{3}g^2\right) mt_{\mathrm{b}}^3 \geqq S^{(\mathrm{cl})} \tag{2.30}$$

と求まる．図 2.3 のように，$a = \frac{1}{2}g$ のとき，作用 $S(a)$ は極小値 $S^{(\mathrm{cl})} = \frac{1}{3}mgt_{\mathrm{b}}^3$ となる．また，$S_T(a)$ と $S_W(a)$ との相対的な関係は

$$\varDelta S(a) \equiv S_T(a) - S_W(a) = \left(a - \frac{g}{2}\right)\left(a + \frac{3}{2}g\right) \cdot \frac{1}{6}mt_{\mathrm{b}}^3 \gtreqless 0 \tag{2.31}$$

のようになる．$a = \frac{1}{2}g$，すなわち，古典的な解 $x_{\mathrm{cl}}(t)$ に対して，S_T と S_W が等しくなってバランスする．

ところで，関数 $x = f(t) \equiv at^2 + bt$ に対する曲率 κ は $\kappa = \frac{2a}{(1+(2at+b)^2)^{3/2}}$ で与えられる．したがって，$2at+b$ が小さい時間領域では，$\kappa \simeq 2a$ と近似できるので，パラメータ a はこの時間領域では曲率パラメータとみてもよい．こうして，2 次の変分関数の範囲に限定すれば，作用は，図 2.3 のように，$x = x_{\mathrm{cl}}(t)$ の曲率のとき極小となる[14)]．

変分関数のとり得る関数空間は無限次元であるから，曲率のような単なる一つのパラメータで作用の変化の様子を調べることはできないので，変分関数のとり方によっては，一般には，作用は $x = x_{\mathrm{cl}}(t)$ で極小とは限らず，停留値となることもある．

いずれにしても，作用がラグランジアンの時間積分で表されることの物理的意味づけができた．すなわち，運動エネルギーに対応する作用と，力による仕事による作用とのバランスで実際の古典的運動が決まる．

2.2　散逸系の変分原理と経路積分量子化

経路積分量子化の根底には変分原理がある．そこで，前節では，自由粒子と調和振動子についての経路積分表示を述べた後に，変分原理を与えるラグランジアンの物理的意義・役割を具体例を用いて丁寧に説明した．

本節では，一般の力学系に対する経路積分表示とシュレーディンガー方程式との関係を説明する．その後で，唯一未解決のままであった，散逸ダイナミクスの変分原理と散逸ラグランジアンの理論[15]を解説する．

2.2.1　一般的な力学系の経路積分表示とシュレーディンガー方程式との等価性

量子力学は本質的に確率的性格を持っており，粒子の振舞いは波動関数 $\psi(x,t)$ で記述され，その存在確率は $|\psi(x,t)|^2$ で与えられる．量子力学の基礎法則はこの波動関数の従うシュレーディンガー方程式で記述される．すなわち，量子力学的状態を表現するものが波動関数 $\psi(x,t)$ であり，これは古典力学のラグランジアン $\mathscr{L}(t)$ を用いて，次の経路積分（遷移振幅）と関係づけられる：

$$Z(x,t;x_0,t_0) = \int_{(x_0,t_0)}^{(x,t)} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_{t_0}^{t} \mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t),t)\right] D[x(t)]. \tag{2.32}$$

ここで，ラグランジアン $\mathscr{L}(x(t),\dot{x}(t),t)$ は，系の運動エネルギー $T=\frac{1}{2}m\dot{x}(t)^2$ とポテンシャルエネルギー $V=V(x(t))$ とを用いて

$$\mathscr{L}(t) = T - V \tag{2.33}$$

と表される[3,5,7,8,12]．また，$D[x(t)]$ はあらゆる経路 $x=x(t)$ $(t_0 \leq t)$ に関する経路積分を表す．系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は $\mathscr{H}=T+V$ と表されるが，ラグランジアンは式 (2.33) のように運動エネルギー T とポテンシャルエネルギー V との差で表される．その物理的役割については前節で詳しく述べた通りである．通常は，x_0 などの過去の詳細によらず，時刻 t と空間座標 x における量子状態を扱うので，この波動関数を $\psi(x,t)$ と書く．どの状態から移ってきたかを指定する波動関数は式 (2.32)，すなわち $Z(x,t;x_0,t_0)$ に比例する量 $K(x,t;x_0,t_0)$ で表される：

$$K(x,t;x_0,t_0) \propto Z(x,t;x_0,t_0). \tag{2.34}$$

この規格化された波動関数 $K(x,t;x_0,t_0)$ を用いると，上に定義した波動関数 $\psi(x,t)$ は明らかに

$$\psi(x,t) = \int_{-\infty}^{\infty} K(x,t;x_0,t_0)\psi(x_0,t_0)dx_0 \tag{2.35}$$

の関係をみたす[3]．

そこで，$K(x,t;x_0,t_0)$ が経路積分 (2.32) で表されるときには，$\psi(x,t)$ が

シュレーディンガー方程式

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,t)}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x,t)}{dx^2}+V(x)\psi(x,t) \tag{2.36}$$

をみたすことを，数学的厳密さ[16]にこだわらずに示すことにしよう．式 (2.35) のような大局的な積分形の定式化から，局所的な表現形式である微分方程式 (2.36) を導くには，t_0 を限りなく t に近づけてみればよい．そこで，$t_0=t-\varepsilon$, $x_0=x+\eta$ とおいて，式 (2.35) の右辺の ε のオーダーの項をテイラー展開により求め，零と置く．その際，式 (2.35) の $K(x,t;x_0,t_0)$ としては，

$$K(x,t;x+\eta,t-\varepsilon)=\frac{1}{A}\exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\mathscr{L}\left(x+\frac{\eta}{2},-\frac{\eta}{\varepsilon}\right)\right] \tag{2.37}$$

とおくことができる．ただし，A は規格化定数である．ここで，$\mathscr{L}$ の中の $x(t)$ としては，中点 $\frac{1}{2}(x+x_0)$ を，$\dot{x}(t)$ としては，差分 $(x-x_0)$ と差分 $(t-t_0)$ の比を用いた．式 (2.35) の $\psi(x_0,t_0)=\psi(x+\eta,t-\varepsilon)$ も η と ε でテイラー展開する：

$$\psi(x_0,t_0)=\psi(x,t)-\varepsilon\frac{\partial\psi}{\partial t}+\eta\frac{\partial\psi}{\partial x}+\frac{\eta^2}{2}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\cdots. \tag{2.38}$$

ここで，すぐわかる通り，$dx_0=d\eta$ を用いて η に関する積分を行うと，η の 1 次の寄与は零になるので，η の 2 次の項まで考慮する必要がある．実際，オーダーとしては，$O(\eta^2)=O(\varepsilon)$ の関係にある[3,13]．また，遷移振幅 (2.37) の指数関数を η で展開すると

$$\begin{aligned}\exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\mathscr{L}\left(x+\frac{\eta}{2},-\frac{\eta}{\varepsilon}\right)\right]&=\exp\left[\frac{i\varepsilon}{\hbar}\left(\frac{m\eta^2}{2\varepsilon^2}-V(x)+\cdots\right)\right]\\ =\exp\left(\frac{im\eta^2}{2\hbar\varepsilon}\right)&\left(1-\frac{i\varepsilon}{\hbar}V(x)+\cdots\right)\end{aligned} \tag{2.39}$$

となる．規格化定数 A は

$$1=\frac{1}{A}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta=\frac{1}{A}\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{2.40}$$

の条件から定められる．すなわち，

$$A=\left(\frac{2\pi i\hbar\varepsilon}{m}\right)^{1/2} \tag{2.41}$$

である．さらに，公式

$$\int_{-\infty}^{\infty}\eta\exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta=0,\qquad\int_{-\infty}^{\infty}\eta^2\exp\left(\frac{im}{2\hbar\varepsilon}\eta^2\right)d\eta=\frac{i\hbar\varepsilon}{m} \tag{2.42}$$

を用いると，式 (2.35) の右辺の ε の 1 次の項の係数は零とおけるので，シュレーディンガー方程式 (2.36) が導かれる[3,13]．

こうして，経路積分による量子力学の定式化が示された．ポテンシャル $V(x)$ が与えられたとき，具体的に経路積分を求めるには，$x(t)$ のフーリエ級数表示

$$x(t) = \sum_n a_n \sin\left(\frac{n\pi t}{\tau}\right) \tag{2.43}$$

を用いると便利である[3,13]．ただし，τ は基本周期である．ポテンシャルが x の 2 次式 $V(x) = \frac{1}{2}kx^2$（調和振動子）の場合には，遷移振幅 $K(x, t; x_0, t_0)$ を厳密に求めることができる[3,13]．しかし，一般の $V(x)$ に対しては，多数のモード間の結合の項が現れるので，非線形効果に関する摂動計算に頼らざるを得ない[3]．ここでは原理的な問題に限って議論することにしよう．

2.2.2 変分原理の研究で残された重要な問題——散逸ダイナミクスの取扱い

すでに説明した通り[3,5,7,8,12,13,16,17]，力学，電磁気学，相対性理論など，時間反転対称性を持つ自然法則の変分原理は確立されている．残された未解決の問題は，時間反転対称性を破る自然法則の変分原理を見出すことである．すでに過去何十年も多くの人々がこの問題に取り組んできたが，どの理論も問題だらけで，物理的に見て満足できるものではない[18~23]．

(i) 変分原理を与える数学的なラグランジアンと物理的なラグランジアン

一般に変関数 $x(t)$ およびその時間微分 $\dot{x}(t)$ に対する作用

$$S = \int_{t_0}^{t_1} f(x(t), \dot{x}(t), t)dt \tag{2.44}$$

を極小または停留値にするような関数 $f(x, \dot{x}, t)$ は次のオイラー・ラグランジュ方程式

$$\frac{d}{dt}f_{\dot{x}} - f_x = \ddot{x}f_{\dot{x}\dot{x}} + \dot{x}f_{\dot{x}x} + f_{\dot{x}t} - f_x = 0 \tag{2.45}$$

をみたす[13,17]．変分原理を見出す研究は，関数 f が与えられたときオイラー・ラグランジュ方程式の解 $x = x(t)$ を求めるのではなく，逆に，$x(t)$ を決める物理的法則がすでにわかっているときに，その方程式を与えるような関数 f を探すことである．これは，いわば変分原理の逆問題である．ここで大きな問題が生じる．式 (2.45) は 2 階の線形偏微分方程式であり，定数倍を除いても，この逆問題の解 $f = f(x, \dot{x}, t)$ は一意的には決まらない．数学的には，どれを用いても $x = x(t)$ を求める手段としては同じであるが，物理的には，自然法則を変分的に捉えて，その係わる現象をより深く統一的に理解できるような変分原理が望ましい．

その場合に，大変面白いことが起こり得る．単に数学的に求めた，ある 1 つのラグランジアン $\mathscr{L}^{(\mathrm{math})}(t)$ と物理的なラグランジアン $\mathscr{L}^{(\mathrm{phys})}(t)$ があって，すべての $x(t), \dot{x}(t), t$ に対し，等式

$$\int_{t_0}^{t_1} f^{(\mathrm{math})}(x(t), \dot{x}(t), t; t_0, t_1)dt = \int_{t_0}^{t_1} f^{(\mathrm{phys})}(x(t), \dot{x}(t), t)dt \tag{2.46}$$

が成り立ち，なおかつ，2 つの被積分関数 $f^{(\mathrm{math})}$ と $f^{(\mathrm{phys})}$ とは一致しない

（全く異なる）ということがあり得る[15]．数学的な関数 $f^{(\mathrm{math})}$ は境界条件に依存する．これから紹介する散逸ダイナミクスの変分原理の理論[15]では，このような面白いことが起こる．そして，この場合には，いろいろ大変便利なことがある．一つは，数学的な関数 $f^{(\mathrm{math})}$ のほうが物理的な関数 $f^{(\mathrm{phys})}$ より簡単なことが多いので，実際の計算には前者を用い，物理的な議論には後者を用いるというような使い分けが可能となる．これは物理の理論としては大変新奇なことではないだろうか．物理的変分の式 $f^{(\mathrm{phys})}$ は，後で説明するように散逸ダイナミクスの場合には経路全体に依存する汎関数で表され，それをさらに時間で積分した作用の変分のとり方が一般に困難である．しかし，恒等式 (2.46) が存在する場合には，通常の被積分関数 $f^{(\mathrm{math})}$ に対する変分計算をすればよいことになり，大変都合がよい．

(ii) 粘性抵抗（摩擦力）のある系の変分原理に関する今までの研究とその難点[18~25]

もっとも典型的な散逸ダイナミクスを記述する方程式として，

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) = F(x(t)); \quad F(x) = -\frac{dV(x)}{dx} \tag{2.47}$$

を考えることにする．ここで，考えている粒子の質量を m，時刻 t における空間座標を $x(t)$，ζ は粘性係数，および $F(x(t))$ は粒子に働く外力とする．この外力 $F(x(t))$ は保存力とする．

この問題に対する変分原理として提案されているものは，筆者の視点に立てばすべて数学的なものである．典型的な例としては，

$$f(x(t), \dot{x}(t)) = \mathrm{e}^{\zeta t/m}\left(T(\dot{x}(t)) - V(x(t))\right) \tag{2.48}$$

が知られている[18, 20~23]．この式は，散逸のない系のラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \equiv T(\dot{x}(t)) - V(x(t)) \tag{2.49}$$

に因子 $\exp\left(\frac{\zeta t}{m}\right)$ をかけただけの単純な式であり，これを極小にする，または停留値にすることの物理的意味は不明である．オイラー・ラグランジュ方程式 (2.45) の解として式 (2.47) が得られるということだけは明らかである．

2.2.3 散逸ダイナミクスの物理的な変分原理

(i) 直観的な理論（発見法的処方）

前項で扱った散逸ダイナミクスの式 (2.47) を例にして，ここでは熱エネルギーを含めたエネルギーバランス（エネルギー保存則）

$$T(\dot{x}(t)) + V(x(t)) + W_{\mathrm{heat}}(t) = \text{一定}; \quad W_{\mathrm{heat}}(t) = \zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds \tag{2.50}$$

に着目し，変分原理を模索してみる[26]．ここで，上式の第 3 項は，粘性抵抗による，時刻 0 から t までの熱の発生量全体を表す．明らかに，上の式を時間で

微分すると，

$$(m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F(x(t)))\,\dot{x}(t) = 0 \tag{2.51}$$

となり，運動方程式 (2.47) が得られる．したがって，式 (2.50) が変分原理から得られるように，散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)$ を設定すればよいことになる．

これからの議論は試行錯誤を重ねて発見法的に進める．今までの長年の研究[18,20~23]は，被積分関数 f を通常の関数空間（変関数 $x(t)$，その微分 $\dot{x}(t)$ および時間 t の顕わな関数）に限定して，2 階の偏微分方程式 (2.45) を解くものであった．このような正攻法では，以下の議論でわかるように，物理的な変分原理を構成する被積分関数としての散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)$ は見つからない．このために，散逸ダイナミクスの変分原理は物理的には長年の間未解決であったものと思われる[15]．

そこで，まずは近似的にでも，物理的な散逸ラグランジアンを探してみよう．そのヒントとして，前節のラグランジアンの物理的意味についての議論を再考する．通常の力学系のラグランジアンは，定数項を除いて，運動エネルギー T と外力のなす仕事量

$$W_{\mathrm{dyn}}(t) = \int_{x(0)}^{x(t)} F(x)dx = V(x(0)) - V(x(t)) \tag{2.52}$$

との和として構成される．ここで，$t_0 = 0$ とした．熱の発生 $W_{\mathrm{heat}}(t)$ があると，それだけ外力による仕事の粒子に与える効果が減ると考えられる．したがって，運動エネルギー $T(\dot{x}(t))$ と $(W_{\mathrm{dyn}}(t) - W_{\mathrm{heat}}(t))$ とがバランスするとみなし，直観的な**散逸ラグランジアン** $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\text{直観})}$ は，定数項を除いて，

$$\begin{aligned}\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\text{直観})}(t) &= T(\dot{x}(t)) + W_{\mathrm{dyn}}(t) - W_{\mathrm{heat}}(t) \\ &= T(\dot{x}(t)) + V(x(t)) - W_{\mathrm{heat}}(t) + (\text{定数})\end{aligned} \tag{2.53}$$

で与えられるとしてよいであろう．よって，直観的な散逸ラグランジアンに対する作用は

$$S_{\mathrm{diss}}^{(\text{直観})} = \int_0^{t_1} \left(T(\dot{x}(t)) + W_{\mathrm{dyn}}(t) - W_{\mathrm{heat}}(t)\right) dt \tag{2.54}$$

で与えられることになる．次の問題は，この作用の変分をどう実行するかということである．なぜならば，散逸ラグランジアン (2.53) は，今までのような通常の関数ではなく，経路に依存する汎関数 $W_{\mathrm{diss}}^{(\text{直観})}(t)$，すなわち，式 (2.50) を用いて表されているからである．関数 $\dot{x}(t)^2$ の 2 重積分の変分は

$$\begin{aligned}\delta\left(\zeta\int_0^{t_1} dt \int_0^t \dot{x}^2(s)ds\right) &= 2\zeta\int_0^{t_1} dt \int_0^t \dot{x}(s)\delta\dot{x}(s)ds \\ = 2\zeta\left(\int_0^{t_1} \dot{x}(t)\delta x(t)dt - \int_0^{t_1} dt\int_0^t \ddot{x}(s)\delta x(s)ds\right)&\end{aligned} \tag{2.55}$$

の形にまでは，部分積分によって変形できるが，依然として第 2 項の 2 重積分の処理という（今までの変分計算には現れてこなかった）新しい困難に遭遇する．上の変形式 (2.55) の第 1 項（の半分）のみを利用すると，正しい運動方程式 (2.47) が得られる．

この議論から，熱の発生の効果を表す表式 (2.50) を基にして（数因子 $\frac{1}{2}$ は別にして），適当に拡張すれば正しい散逸ラグランジアンが求まるだろうとおおよその見当がつく．（これが式 (1.4) の 1 行上の「おおむね」の意味である．）

数因子 $\frac{1}{2}$ に関しては，変分原理とは直接結びつかない今までのオイラー・ラグランジュの式に非保存力（non-conservative force）の効果 $\Phi(t) = \frac{1}{2}\zeta\dot{x}(t)^2$（散逸関数と通常呼ばれている）を付け加えた式

$$\frac{d}{dt}\left(\frac{d\mathscr{L}}{d\dot{x}(t)}\right) - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial x(t)} = \frac{\partial\Phi(t)}{\partial\dot{x}(t)} \tag{2.56}$$

が参考になるであろう．ただし，$\Phi(t)$ そのままでは変分原理には役立たないが，筆者の輸送現象に対する変分原理の基本理念[26, 27]

"定常状態では，そこに到る途中の過程を考慮に入れた積分されたエントロピー生成が最小になる"

に基づいて散逸関数 $\Phi(t)$ を時間で積分した，いわば "散逸エネルギー関数"

$$W_{\mathrm{diss}}^{(0)}(t) = -\int_0^t \Phi(s)ds = -\frac{1}{2}\zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds \tag{2.57}$$

が，散逸ダイナミクスの物理的変分原理を見出す出発点になることを次に示す．

(ii) くり込まれた散逸ラグランジアンの構成

ここの目的は，散逸ダイナミクス方程式 (2.47) を与える **"物理的" 散逸ラグランジアン**

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t) = \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) + W_{\mathrm{diss}}(t) \tag{2.58}$$

を構成することである．ただし，散逸項 $W_{\mathrm{diss}}(t)$ は熱の発生と直接係る表式 $W_{\mathrm{heat}}(t) = -2W_{\mathrm{diss}}^{(0)}(t)$ を主たる項として含む "物理的な" ものであって欲しい．

そこで，$W_{\mathrm{diss}}(t)$ として

$$W_{\mathrm{diss}}(t) = W_{\mathrm{diss}}^{(0)}(t) + R_{\mathrm{diss}}(t); \quad R_{\mathrm{diss}}(t) = \int_0^t Q_{\mathrm{diss}}(s)ds \tag{2.59}$$

の形を仮定し，$Q_{\mathrm{diss}}(t)$ を探すことにする．

この系の作用は，$t_1 = \tau$ とおいて，

$$\begin{aligned} S_{\mathrm{diss}} &= \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)dt + \int_0^\tau W_{\mathrm{diss}}(t)dt \\ &= \frac{m}{2}\int_0^\tau \dot{x}(t)^2 dt - \int_0^\tau V(x(t))dt - \frac{\zeta}{2}\int_0^\tau dt\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds \end{aligned}$$

$$+\int_0^\tau dt\int_0^t Q_{\rm diss}(s)ds \tag{2.60}$$

という 2 重積分を含む形になるので，これらの変分をとる際に，前述した通り数学的な工夫を要する．

幸いに，次の公式がこの問題を解くのに大いに役立つ：任意の関数 $f(t)$ に対して

$$\int_0^\tau dt\int_0^t f(s)ds=\int_0^\tau(\tau-t)f(t)dt \tag{2.61}$$

が成り立つ．この公式は，両辺を τ で微分してみれば，その両辺が一致し，$\tau=0$ に対しても両辺 0 になることから容易に確かめられる．より一般に次の公式が知られている：

$$\int_0^\tau dt_1\int_0^{t_1}dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}}f(t_n)dt_n=\frac{1}{(n-1)!}\int_0^\tau(\tau-t)^{n-1}f(t)dt. \tag{2.62}$$

これらの公式の利用に気づくことが "物理的" 散逸ラグランジアンを見出すためのキーポイントの一つである．式 (2.60) の第 3 項の変分から，粘性項 $\zeta\dot{x}(t)$ が求まるように，$W_{\rm diss}(t)$ を決めたい．公式 (2.61) を用いると，式 (2.60) の最右辺の第 3 項は

$$-\frac{\zeta}{2}\int_0^\tau dt\int_0^t \dot{x}(s)^2ds=-\frac{\zeta}{2}\int_0^\tau(\tau-t)\dot{x}(t)^2dt \tag{2.63}$$

である．よってこの項の変分からのオイラー・ラグランジュ方程式 (2.45) への寄与は

$$\ddot{x}(t)f_{\dot{x}\dot{x}}+\dot{x}(t)f_{\dot{x}t}\to-\zeta(\tau-t)\ddot{x}(t)+\zeta\dot{x}(t) \tag{2.64}$$

となり，**粘性項** $\zeta\dot{x}(t)$ が得られるが，同時に余分な項も現れる．このように質量が時間と共に変化するような効果を与える項は，くり込んで消えるようにうまく $R_{\rm diss}(t)$ を決めなければならないと思われる．しかし，そのような $R_{\rm diss}(t)$ は見つかりそうにない．例えば，次のような 3 重積分（散逸関数の多重積分）

$$\int_0^\tau R_{\rm diss}(t)dt\to\int_0^\tau dt\int_0^t dt_1\int_0^{t_1}\frac{\zeta}{2}\dot{x}(t)^2dt_2 \tag{2.65}$$

を考えると，公式 (2.62) を用いて，これは

$$\frac{1}{2!}\int_0^\tau(\tau-t)^2\left(\frac{\zeta}{2}\dot{x}(t)^2\right)dt \tag{2.66}$$

と変形できるので，オイラー・ラグランジュ方程式への寄与は

$$\frac{1}{2!}\left(\zeta(\tau-t)^2\ddot{x}(t)-\zeta(\tau-t)\dot{x}(t)\right) \tag{2.67}$$

となる．このように，どんなに高次の多重積分を付け加えても，低次が消えずに却って $(\tau-t)$ の高次が増えるばかりである．そこで，この情況を逆手にと

り，無限に高次の多重積分を付け加えて（くり込んで），次の形のオイラー・ラグランジュ方程式

$$g(t)\left(m\ddot{x}(t)+\zeta\dot{x}(t)-F(x(t))\right)=0 \tag{2.68}$$

を導くように $R_{\mathrm{diss}}(t)$ を決めることにする．もし，因子 $g(t)$ が零にならない関数となるようにとれれば，望みの運動方程式 (2.47) が得られることになる．高次のくり込みまで系統的に検討してみると，運良く上の戦略はうまく適用できることがわかった[15)]．その結果は次の通りである：

$$W_{\mathrm{diss}}(t)=\sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\zeta}{m}\right)^{n}\int_{0}^{t}dt_1\int_{0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{0}^{t_{n-1}}\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t_n)dt_n, \tag{2.69}$$

および

$$g(t)=\exp\left(\frac{\zeta}{m}(t-\tau)\right). \tag{2.70}$$

これに対応する $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)$ は

$$\int_{0}^{\tau}\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)dt=\int_{0}^{\tau}\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t)dt \tag{2.71}$$

によって定義され，それは，式 (2.62) を用いると，

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)=\mathrm{e}^{(t-\tau)\zeta/m}\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t)=\mathrm{e}^{(t-\tau)\zeta/m}\left(T(\dot{x}(t))-V(x(t))\right) \tag{2.72}$$

で与えられることがわかる．明らかに，これは，式 (2.69) の $W_{\mathrm{diss}}(t)$ を用いた物理的ラグランジアン (2.58) とは全く異なる通常の関数である．大変興味深いことに，これは式 (2.48) と因子 $\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ を除いて一致している．その結果，今までのラグランジアン (2.48) を用いた計算はこの因子の影響を除けば正しい結果を与えることになる．しかし，この因子の存在は非常に大きく，次節で議論するように極めて本質的である．

以上のように，時間反転対称性を破る散逸ダイナミクスに対しても物理的な散逸ラグランジアンが発見され，それを用いた変分原理が確立された．こうして，変分原理によって，不可逆過程まで含めて統一的に自然法則を表現することができるようになった．散逸ラグランジアンの中の粘性係数の 1 次の項 $W_{\mathrm{diss}}^{(0)}(t)$ は散逸関数 $\Phi(t)$ の時間積分（に負符号つけたもの）であるから，ζ が小さいときには，散逸ラグランジアンは熱の発生量そのものを用いて与えられることになり，これは物理的である．高次のくり込みの効果も散逸関数の時間に関する多重積分で与えられるのは興味深い．散逸ラグランジアンのより直接的な導出法と経路積分量子化については次節で解説する．また，粘性係数 ζ が $\dot{x}(t)$ に依存する非線形の場合への拡張についても次節で説明する．

2.3 非線形散逸系の変分原理と経路積分量子化

前節では，線形の散逸系の変分原理を与えるラグランジアンを発見法的に導出した．本節では，その結果を簡潔な表式に書き直し，物理的な解釈をし易くする．このような新しくわかり易い定式化を用いて，未解決の問題として残されていた "非線形散逸系の変分原理を与える散逸ラグランジアンの構成" という課題を肯定的に解説する．これらのラグランジアンを用いると，散逸系の経路積分量子化が可能となる．その定式化を用いて，散逸系の不確定性関係式を導くことができる．これらの議論には，経路に依存した散逸ラグランジアンの時間積分としての作用の変分をとるという新しい数学的手段が必要になる．この数理的な取扱いについても詳しく説明する．

2.3.1 線形散逸系における物理的ラグランジアンの簡潔な表式

散逸系のラグランジアンには，単に数学的なものから，エネルギー散逸（発熱）を表す物理的な表式までいろいろある．任意の正の数 τ と解析関数 $x(t)$ に対して，恒等式

$$\int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}^{(\rm math)}(t)dt = \int_0^\tau \mathscr{L}_{\rm diss}(t)dt \tag{2.73}$$

を満たせば，どの表式 $\mathscr{L}_{\rm diss}(t)$ も変分原理のラグランジアンになり得る．変関数 $x(t)$ に対する**散逸的な運動方程式**

$$m\ddot{x}(t) + \zeta\dot{x}(t) - F(x) = 0 \tag{2.74}$$

を変分原理で与えるラグランジアンは，前節でふれた通り，$\gamma = \frac{\zeta}{m}$ として

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{(\rm math)}(t) = {\rm e}^{\gamma(t-\tau)}\mathscr{L}_{\rm dyn}(t);\ \mathscr{L}_{\rm dyn}(t) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - V(x(t)) \tag{2.75}$$

で与えられるが，これは数学的な表式に過ぎず，物理的なものとは言えない．このままでは，熱の発生と直接結びつかないからである．そこで，式 (2.73) を満たす（作用としては同じ値を与える）ような表式で，なおかつ熱の発生の効果

$$\zeta\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds = (\text{粘性抵抗力}) \times (\text{距離})$$

を顕わに示すような物理的ラグランジアンをもう一度議論する．前節で述べた物理的な散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\rm diss}(t) = \mathscr{L}_{\rm diss}(t) - \mathscr{L}_{\rm dyn}(t)$ は次のような多重積分の無限級数

$$W_{\rm diss}(t) = \sum_{n=1}^{\infty}\left(-\frac{\zeta}{m}\right)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} \mathscr{L}_{\rm dyn}(t_n)dt_n \tag{2.76}$$

で表され，第 1 項

$$W_{\rm diss}^{(1)}(t) = -\frac{\zeta}{2}\int_0^t \dot{x}(s)^2 ds + \gamma\int_0^t V(x(s))ds \tag{2.77}$$

以外の高次の項は扱いにくく，あまり実用的な表式でない．それらの高次の項は，第 1 項 $W^{(1)}_{\rm diss}(t)$ へのくり込みの効果を表すものと考えられるが，より物理的解釈のできる簡潔な表式が欲しい．実は，前節で述べた通り，数学的ラグランジアンと物理的ラグランジアンを議論する際に，次の多重積分の変換公式が大きなヒントになった．

公式 2.1　任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau dt\int_0^t dt_1\cdots\int_0^{t_{n-1}} f(t_n)dt_n = \frac{1}{n!}\int_0^\tau (\tau-t)^n f(t)dt. \qquad (2.78)$$

上の公式 2.1 をさらに一般化するには，次の公式が役に立つ．

公式 2.2　任意の 2 つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau g(\tau-t)f(t)dt = g(0)\int_0^\tau f(t)dt + \int_0^\tau dt\int_0^t g^{(1)}(t-s)f(s)ds. \quad (2.79)$$

これを証明するには，よく知られている方法であるが，両辺を τ で微分したものが等しいことを確めればよい（$\tau=0$ に対して両辺が等しいことは明らかである）．この公式 2.2 を漸化的にくり返すと，次の公式が容易に導かれる．

公式 2.3　任意の自然数 n と任意の 2 つの解析関数 $f(t)$ と $g(t)$ に対して次式が成り立つ[15)]：

$$\int_0^\tau g(\tau-t)f(t)dt = \int_0^\tau dt\int_0^t dt_1\cdots\int_0^{t_{n-1}} g^{(n)}(t_{n-1}-t_n)f(t_n)dt_n + \sum_{k=1}^{n-1} g^{(k)}(0)\int_0^\tau dt\int_0^t dt_1\cdots\int_0^{t_{k-1}} f(t_k)dt_k. \quad (2.80)$$

特に，$g(t)=t^n$ とおけば，式 (2.78) が得られる．この公式は後で有効に用いられる．さらに，次のように一般化することもできる[15)]．

公式 2.4　任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau f(\tau,t)dt = \int_0^\tau dt\int_0^t f_t(t,s)ds + \int_0^\tau f(t,t)dt. \qquad (2.81)$$

ただし，$f_t(t,s)$ は $f(t,s)$ の t に関する偏微分を表す．

この公式は，2 変数関数 $f(t,s)$ の長方形の領域 $\{0\le t\le\tau, 0\le s\le\tau\}$ を 2 つの 3 角領域に分割した次の公式から容易に導かれる．

公式 2.5　任意の解析関数 $f(t,s)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^\tau dt\int_0^\tau f(t,s)ds = \int_0^\tau dt\int_0^t f(t,s)ds + \int_0^\tau dt\int_0^t f(s,t)ds. \quad (2.82)$$

ここまで一般化すると当り前の公式に見えてしまうが，公式 2.1〜2.5 は大変有

用な公式であり，後で有効に用いられる．

ついでながら，これらの公式（いやすべての公式）に共通な特徴は変数 t に時間のような次元を与えて考えると，両辺の次元が一致することである．このことは，物理分野の人にとっては自明のことであるが，数学の公式を捉えるときにも大変役に立つ．例えば，公式 2.1，すなわち式 (2.78) でみると，$(n+1)$ 重積分が 1 重積分に変換されているが，右辺の被積分関数の t の次元は，両辺共通の $f(t)$ の次元を除いて，$(n+1)$ 次元になっており，両辺の次元が一致していることがわかる．逆に，この自明な事実を用いると，式 (2.78) の $f(t)$ にかかる因子 $(\tau-t)^n$ の中が n であることを容易に思い出すことができ，便利である．次元を考えるということは，数式を幾何学的に捉えることにも通じる．例えば，物理でよく使われる定積分の公式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{-x^2} dx = \sqrt{\pi} \tag{2.83}$$

には，π が入っている．これを幾何学的に解釈し，半径 R の円の面積 πR^2 または円周 $2\pi R$ と結びつければ，式 (2.83) の証明法がわかることになる．これもよく知られている通りである（すなわち，式 (2.83) の両辺を二乗して面積分に変換する）．

少し数学の公式に深入りしたが，これらの公式を準備すれば，我々の物理の問題の解決へのヒントが得られる．物理的な散逸ラグランジアン $\mathscr{L}_{\text{diss}}^{(\text{phys})}$ は，熱の発生と関係した式 (2.77) からも予想されるように，経路に依存した表式，すなわち時間 t の積分で表されると考えられる．そして，式 (2.73) に対応して，

$$\int_0^{\tau} \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} \mathscr{L}_{\text{dyn}}(t)dt = \int_0^{\tau} \mathscr{L}_{\text{diss}}^{(\text{phys})}(t)dt \tag{2.84}$$

が成り立つはずである．公式 2.2 において $g(t) = \mathrm{e}^{-\gamma t}$ とおいた次の公式を用いることに気づくことが，今の問題を解くキーポイントの一つである．

公式 2.6 任意の解析関数 $f(t)$ に対して次式が成り立つ：

$$\int_0^{\tau} \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} f(t)dt = \int_0^{\tau} f(t)dt - \gamma \int_0^{\tau} dt \int_0^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} f(s)ds. \tag{2.85}$$

こうして，上の式 (2.85) で $f(t) = \mathscr{L}_{\text{dyn}}(t)$ とおき，右辺の t 積分を一つにまとめて，式 (2.84) と比較すれば，次の簡潔な物理的ラグランジアンが求まる：

$$\mathscr{L}_{\text{diss}}^{(\text{phys})}(t) = \mathscr{L}_{\text{dyn}}(t) - \gamma \int_0^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} \mathscr{L}_{\text{dyn}}(s)ds. \tag{2.86}$$

すなわち，散逸ラグランジアンの散逸項 $W_{\text{diss}}(t)$ は

$$\begin{aligned} W_{\text{diss}}(t) &\equiv \mathscr{L}_{\text{diss}}^{(\text{phys})}(t) - \mathscr{L}_{\text{dyn}}(t) \\ &= -\frac{\zeta}{2}\int_0^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} \dot{x}(s)^2 ds + \gamma \int_0^{t} \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} V(x(s))ds \end{aligned} \tag{2.87}$$

と表される[15]．式 (2.87) の第 1 項が望み通り，熱の発生の効果を表しているが，散逸エネルギーそのもの（式 (2.77) の右辺第 1 項）ではなく，重みつき（コンボリューション，すなわち $\exp(-\gamma(\tau-t))$ の因子つき積分の形）になっているところが大変興味深い．定常状態の変分原理[26, 27]では，それは重みなしの時間積分で表されるが，過渡現象の変分原理ではさらに重みまで現れることは注目すべきことである．オンサーガー・マクラップ[28]の変分理論では瞬間のエネルギー散逸を扱っているが，新理論では重みは遠い過去になるほど小さくなるが途中の過程まで考慮に入れた**エネルギー散逸（エントロピー生成）**を扱うところが本質的である．

さらに，興味深いことに，式 (2.86) の右辺の第 2 項の積分因子の指数関数 $\exp(-\gamma(t-s))$ をテイラー展開し，公式 2.1，すなわち式 (2.78) を用いると，前節でくり込みの処法で導いた，多重積分の無限級数 (2.76) が直接導かれる．

こうして，線形系の散逸ダイナミクスに対する変分原理の問題は物理的にも見事に解決された．

2.3.2 非線形な散逸系における数学的ラグランジアンの導出

ここでは，さらに粘性係数 ζ が速度 $\dot{x}(t)$ に $\zeta=\zeta(\dot{x}(t))$ のように依存する非線形散逸系の変分原理[15]を説明する．すなわち，運動方程式

$$m\ddot{x}(t)+\zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t)-F(x(t))=0 \tag{2.88}$$

で記述される非線形散逸ダイナミクスを変分原理から導く．

ここではまず第一に，数学的な散逸ラグランジアンを探すことにする．これも長年の難問であるから，正攻法ではうまくいかない．すなわち，オイラー・ラグランジュ方程式

$$\ddot{x}f_{\dot{x}\dot{x}}+\dot{x}f_{\dot{x}x}+f_{\dot{x}t}-f_x=0 \tag{2.89}$$

から運動方程式 (2.88) が得られるように，作用の被積分関数 $f(x(t),\dot{x}(t),t)$ を求めるという‘変分理論の逆問題’を解くことには，今までのところ誰も成功していない．そこで，ここでも発見法的に話を進める．前節で解説した線形系の数学的な散逸ラグランジアン (2.75) は，あえて積分を使って書くと

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math,linear})}(t;\tau)=\exp\left(\int_\tau^t\gamma ds\right)\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{2.90}$$

となる．これを γ が $\gamma=\frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t))\equiv\gamma(\dot{x}(t))$ のように，速度 $\dot{x}(t)$ に依存する場合に式 (2.90) を拡張する，もっともナイーヴな形は，$0\le t\le\tau$ に対して

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{trial})}(t;\tau)=\exp\left(\int_\tau^t\gamma(\dot{x}(s))ds\right)\mathscr{L}_{\mathrm{dyn}}(t) \tag{2.91}$$

であろう．一見，オイラー・ラグランジュ方程式 (2.89) の $f_{\dot{x}t}$ に相当する項か

ら，式 (2.88) の散逸項 $\zeta(\dot{x}(t))\dot{x}(t)$ が出そうに見えるが，この議論は数学的に全く誤りである（これで「できた」と思った人は過去にもいるのではなかろうか．筆者もその一人である！）．式 (2.90) のように，ラグランジアンそのものが $x(t)$ の経路によるような汎関数で表されるような全く新しい変分理論[15]では，オイラー・ラグランジュ方程式 (2.89) は使えない．式 (2.91) の積分の中の $\dot{x}(s)$ も $\dot{x}(s)+\delta\dot{x}(s)$ のように変化させて変分をとらなければならないからである．

そこで，オイラー・ラグランジュ方程式が使えるようにするため，変分をとる際に指数因子は時間微分だけで済むように，変関数 $x(t)$ ではなく，ある固定した関数 $\dot{x}_*(t)$ （後でうまく決める）を用いた積分を考え，非線形系 (2.88) の数学的な散逸ラグランジアンとして

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t;\tau) = \exp\left(\int_\tau^t \gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)\mathscr{L}_{\rm dyn}(t) \tag{2.92}$$

を導入する[15]．これは，$x_*(t)$ を後で適当に決める固定された関数とみなせば，$x(t), \dot{x}(t)$ および時間 t の通常の関数であるから，

$$\text{作用 } I = \int_0^T \mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (math)}(t;\tau)dt = \text{極値} \tag{2.93}$$

とするような変関数 $x(t)$ は，オイラー・ラグランジュ方程式 (2.89) より，零でない指数因子を除いて

$$m\ddot{x}(t) + \zeta(\dot{x}_*(t))\dot{x}(t) - F(x(t)) = 0 \tag{2.94}$$

という，$x(t)$ に関する，みかけ上（有効的に）線形の方程式をみたす．この方程式 (2.94) を解くと，その解には $\dot{x}_*(t)$ が含まれる．そこで，この段階で条件

$$x(t) = x_*(t),\ \text{すなわち，}\ \dot{x}(t) = \dot{x}_*(t) \tag{2.95}$$

をつけることにする．こうすると，この新変分原理から求めた解は，もとの方程式 (2.88) の解と一致し，同じ非線形な散逸ダイナミクスを記述することになる．

この非線形な散逸ダイナミクスの変分原理では，**粘性係数** $\zeta(\dot{x}(t))$ すなわち $\gamma(\dot{x}(t)) = \frac{1}{m}\zeta(\dot{x}(t))$ の中の $\dot{x}(t)$ は，変関数とみるのではなく，実際に起こる軌道 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ の関数として捉えることが妥当であるという概念的な主張が提唱されている．次の項で求める，非線形な散逸系の物理的ラグランジアンにおいては，これは概念的に重要な意味を持つことを強調しておきたい．

2.3.3 一般の非線形系における物理的な散逸ラグランジアン

前項で求めた数学的な散逸ラグランジアンを基にして，熱の発生と直接係わるような，非線形系の物理的な散逸ラグランジアンを探してみよう．式 (2.92) を関係式 (2.73) に代入して，2.3.1 項で示した数学的な公式 2.4，すなわち式 (2.81) を用いると非線形系の物理的な散逸ラグランジアンは

$$\mathscr{L}_{\rm diss}^{\rm (phys)}(t) = \mathscr{L}_{\rm dyn}(t) - \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t'))\exp\left(\int_t^{t'}\gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)\mathscr{L}_{\rm dyn}(t')dt' \tag{2.96}$$

で与えられることがわかる．この式の右辺の第 2 項は

$$\begin{aligned} W_{\rm diss}(t) = & -\frac{1}{2}\int_0^t \zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2 \exp\left(\int_t^{t'}\gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)dt' \\ & + \int_0^t \gamma(\dot{x}_*(t'))\exp\left(\int_t^{t'}\gamma(\dot{x}_*(s))ds\right)V(x(t'))dt' \end{aligned} \tag{2.97}$$

と書き表せるから，式 (2.97) の右辺第 1 項が，線形系の場合と同様に，重みつきの熱の発生量を表しており，式 (2.96) は望み通り物理的であることがわかる．ただし，$\zeta(\dot{x}(t)) > 0$ の条件が必要である．この条件の下では，式 (2.96) と式 (2.97) の指数因子は，$t' < t$ の時間領域で

$$\exp\left(\int_t^{t'}\gamma(\dot{x}_*(s))ds\right) = \exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^{t}\zeta(\dot{x}_*(s))ds\right) < 1 \tag{2.98}$$

となり，しかも，熱の発生の時刻 t' が運動の時刻 t から遠くなるほど，変分への熱の発生の効き方が次式

$$\frac{1}{2}\exp\left(-\frac{1}{m}\int_{t'}^{t}\zeta(\dot{x}_*(s))ds\right)\zeta(\dot{x}_*(t'))\dot{x}(t')^2 \tag{2.99}$$

に比例して小さくなることに注意してほしい．さらに，この変分理論の特徴としては，粘性係数の時間依存性が真の運動 $x_*(t)$ で決まることである．もし，この粘性係数 ζ が変関数 $\dot{x}(t)$ そのもので変化するような変分関数すなわちラグランジアンを探し，たとえ見つかったとしても，それはあまりにも複雑であり物理的に解釈し難いものであろう．そういう変分関数は存在しないのかもしれない．少なくとも，比較的簡潔で物理的な散逸ラグランジアン (2.96) が見つかったことは大きな前進である．いずれにしても，以上のように非線形系の散逸ダイナミクスを変分原理で扱うことも可能となった．

2.3.4 多様な変分原理—より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

すでに述べた通り，変分原理を与える変分関数は一意的ではなく，多様である．要は物理的に解釈し易いラグランジアンを見出すことである．式 (2.86) で与えた表式がもっとも簡潔な物理的ラグランジアンに見えるが，それを具体的に書き表すと，式 (2.87) のようになり，第 1 項は望み通り熱の発生を表しているものの，第 2 項が物理的に捉えにくい．そこで，この第 2 項をむしろ，式 (2.86) のポテンシャル項 $-V(x(t))$ とまとめてみることにする．再び，公式 2.6 を用いて導かれる次の公式に着目する：

$$\int_0^\tau \left(V(t) - \gamma \int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)} V(s) ds \right) dt = \int_0^\tau \mathrm{e}^{-\gamma(\tau - t)} V(t) dt. \quad (2.100)$$

ただし，$V(t) = V(x(t))$ である．上の関係式に気づくと，次のような，より簡潔な物理的散逸ラグランジアン

$$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{phys})}(t;\tau) = \frac{m}{2}\dot{x}(t)^2 - \mathrm{e}^{-\gamma(\tau-t)} V(x(t)) - \frac{\zeta}{2}\int_0^t \mathrm{e}^{-\gamma(t-s)}\dot{x}(s)^2 ds \quad (2.101)$$

が見出される[15]．式 (2.86) には，時間の区間 $0 \leq t \leq \tau$ の端 τ は含まれていないが，式 (2.101) にはそれが含まれているのが特徴である．しかも，$t = \tau$ で式 (2.101) の第 2 項は $V(x(t))$ そのものになり，第 1 項と合わせて通常の力学系のラグランジアンとなる．要するに，式 (2.101) の第 2 項は，散逸効果でくり込まれたポテンシャルと解釈でき，式 (2.101) は全体として物理的にもっともわかり易い散逸ラグランジアンであると言える[15]．これは非線形系に拡張できる．

2.3.5 散逸ダイナミクスの経路積分量子化

散逸ダイナミクスのラグランジアン $\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)$ が求まったので，これを用いた経路積分

$$Z(\tau, 0) = \int_{\mathrm{ini}}^{\mathrm{fin}} \exp\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^\tau \mathscr{L}_{\mathrm{diss}}(t)dt\right] D[x(t)] \quad (2.102)$$

によって，この散逸系を量子化することができる．不確定性関係などの物理的な計算をする場合でも，$\mathscr{L}_{\mathrm{diss}}^{(\mathrm{math})}(t)$ を用いると便利である．今までの多くの計算結果の問題点[18~23]は因子 $\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ を考慮すると解決する[15]．例えば，不確定性関係式は式 (2.75) を用いると，$\langle \Delta x \Delta p \rangle_t \geq \frac{\hbar}{2}\exp\left(-\frac{\zeta\tau}{m}\right)$ となり[15]，右辺が $\frac{\hbar}{2}$ より小さくなり困難が生じるが，新しい理論では，$0 \leq t \leq \tau$ という変分の時間領域内で，

$$\langle \Delta x \Delta p \rangle_t \geq \frac{\hbar}{2}\exp\left(\frac{\zeta}{m}(\tau - t)\right) \geq \frac{\hbar}{2} \quad (2.103)$$

となり，物理的な結果を与える[15]．

非線形な散逸系 (2.88) を経路積分量子化する場合には，数学的ラグランジアン (2.92) を用いるのが便利である．なぜなら，関係式 (2.73) によって作用は同じになるからである．ただし，粘性係数の時間依存性は真の運動 $x_*(t)$ の微分 $\dot{x}_*(t)$ で与えられるものとする．

物理を変分原理で捉えることは物理法則やそれに基づく物理現象を概念的に深く理解するために極めて重要である[5,13]．散逸系の変分原理が見つかったことにより，時間反転対称性を破る散逸系まで含めて，物理法則を変分原理により統一的に扱うことができるようになった．定常系の変分原理[26,27]でも瞬間のエ

ントロピー生成ではなく時間積分された量が非線形では本質であることが筆者により指摘されたが，時間の矢が重要な意味を持つ不可逆現象の世界では，対象とする現象の起こる時刻に近いエネルギー散逸（発熱）ほど変分に大きく効く．これは不可逆現象を概念的に捉える際に深い示唆を与える．上に説明した散逸系の変分原理と散逸ラグランジアンはいろいろな応用が将来期待される．これらの散逸ラグランジアンを用いることにより，古典的な散逸系の経路積分量子化が可能となり，散逸効果をとり入れた不確定性関係式も導けることになった．

参考文献

1) P.A.M. Dirac, *The Principles of Quantum Mechanics* (Oxford, 1930 and 1958 (Fourth Edition)).
2) R.P. Feynman, *Rev. Mod. Phys.* **20**, 371 (1948).
3) R.P. ファインマン/A.R. ヒッブス著，北原和夫訳，『ファインマン経路積分と量子力学』（マグロウヒル出版，1990）．
4) R.P. Feynman, R.B. Leighton and M. Sands, *The Feynman Lectures on Physics*, Vol II. Reading MA (Addison-Wesley, 1964).
5) 鈴木増雄，「物理学における変分原理——自然は無駄を嫌う」，「パリティ」2010 年 8 月号（丸善出版）．
6) 鈴木増雄，「変分原理と物理学」，「パリティ」2012 年 9 月号〜11 月号（丸善出版）．
7) 大貫義郎，柏太郎，鈴木増雄，『経路積分の方法』（岩波書店，2000）．
8) 加藤光裕，「ニュートン力学と解析力学」，「数理科学」2014 年 4 月号（サイエンス社）．
9) M. Suzuki, *Physica A***392**, 314 (2013) の第 5 節．
10) M. Suzuki, APPC 12 のプロシーディングス（2014 年）．
11) M. Suzuki, to be submitted to *Physica A*.
12) 吉岡大二郎，『力学』（朝倉書店，2008）．
13) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2017 年第 3 刷）．
14) 長沼伸一郎，『物理数学の直観的方法』ブルーバックス（講談社，2011）．
15) M. Suzuki, *JPS Conf. Proc.* **1** (2014) 012128, and *Physica A* (in preparation).
16) T. Kato, *Perturbation theory for linear operators*, Springer, 第 2 版 (1976).
17) 鈴木増雄，『活力を与える「物理」』（オーム社，2007）．
18) 大貫義郎，岩波講座『力学』第 1 章（岩波書店，1994）．
19) 佐野雅巳，「力学的エネルギー」，「数理科学」2013 年 8 月号（サイエンス社）．
20) P. Caldirola, *Il Nuovo Cimento B***77** (No.2) (1983) 241.
21) C.C. Gerry, *J. Math. Phys.* **25** (6) (1984) 1820. この論文では，変分原理よりも経路積分量子化に主眼がある．
22) H. Majima and A. Suzuki, *Ann. of Phys.* **326** (2011) 3000.
23) C-I. Um, K-H. Yeon and T.F. George, *Phys. Rep.* **362** (2002) 63.
24) C.R. Galley, *Phys. Rev. Lett.* **110** (2013) 174301. この論文では，Keldysh の 2 時間グリーン関数を用いて，しかも通常の変分原理の境界条件ではなく，初期条件のみを用いており，この理論が物理的な理論であるかどうかは検討の余地がある．この論文を教えてくれた桑原幸朗氏に感謝致します．
25) Y. Kuwahara, Y. Nakamura and Y. Yamanaka, *Phys. Lett. A***377** (2013) 3102.
26) M. Suzuki, *Physica A***392** (2013) 314.
27) M. Suzuki, *Physica A***392** (2013) 4279.
28) L. Onsager and S. Machlup, *Phys. Rev.* **91** (1953) 1505.

第 3 章
量子古典対応

3.1 非可換系を可換系で表現する

前章では，古典的な運動の法則が与えられたとき，それを量子的な法則として捉える手段として経路積分が非常に有効であることを解説してきた．本章では，その逆の定式化について説明する．すなわち，もともと量子力学の枠組みで導入され定義される物理系（例えばディラックの相対論的電子論で導入されたスピンとその多体系）を古典表示で扱う．その中心的概念は**量子古典対応**[1~7]である．

この対応関係を利用することにより，量子系の計算機シミュレーションが可能となり，量子モンテカルロ法が開発された[1,4,6,8]．その基本的なアイデアと実際の応用例[8,9]を解説する．

また，量子古典対応関係を導く基礎になる数学公式であるトロッター公式[10~12]およびその拡張，特に筆者が開発した高次の指数積分解公式を詳しく説明する[13,14]．

3.1.1 量子と古典のかけはし

一般に，量子力学的な系は，非可換な演算子からなるハミルトニアン $\mathscr{H}$ で記述される．その系の状態 $|\Psi(t)\rangle$ の時間発展は，$\mathscr{H}$ の指数演算子を用いて

$$|\Psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}}|\Psi(0)\rangle \tag{3.1}$$

と表される．これを具体的に求めるには，$\mathscr{H}$ を記述するヒルベルト空間の任意の正規直交基底 $\{|\alpha\rangle\}$，$|\alpha'\rangle$ の間の行列要素（すなわち，遷移行列要素）

$$\langle\alpha|\exp(x\mathscr{H})|\alpha'\rangle \equiv T_{\alpha\alpha'}(x) \tag{3.2}$$

を計算すればよい．ハミルトニアン $\mathscr{H}$ が解析的に対角化できる場合は例外的であり，通常は対角化が困難である．そこで，$\mathscr{H}$ を対角化しないで式 (3.2) を

求める一般的な処法をこれから説明する．それが量子古典対応の考え方である．まず，指数関数の特徴を利用して

$$
\begin{aligned}
T_{\alpha\alpha'}(x) &= \langle\alpha|\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}\mathscr{H}}\right)^n|\alpha'\rangle \\
&= \sum_{\alpha_1}\sum_{\alpha_2}\cdots\sum_{\alpha_{n-1}} T_{\alpha\alpha_1}\left(\frac{x}{n}\right)T_{\alpha_1\alpha_2}\left(\frac{x}{n}\right)\cdots T_{\alpha_{n-1}\alpha'}\left(\frac{x}{n}\right)
\end{aligned}
\tag{3.3}
$$

と変形する．ここで，$\frac{x}{n}\mathscr{H}$ の大きさ（ノルム）が充分小さくなるくらい，n を大きくとれば，式 (3.3) の各部分の行列要素 $T_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ を精度良く求めることは後で述べるように可能である[1~14]．近似的な行列要素 $\tilde{T}_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ を構成する際に留意すべき重要なことは次の事項である．

- 元の系の相互作用が短距離力の場合には，近似的に構成した $\tilde{T}$ を幾何学的に表現した（格子上の）相互作用もまた短距離力になること（必ずしも自明でない）．
- 元の系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ の対称性を保持すること．例えば，スピン系の場合の内部対称性（O(3) 対称性など）を保つ近似を作ること．
- 近似の精度を上げ，なおかつ収束性・安定性を良くすること．

このように，$T_{\alpha_j\alpha_{j+1}}\left(\frac{x}{n}\right)$ に対する何らかの近似公式を用いて行列要素 $T_{\alpha\alpha'}(x)$ をパラメータの組（$\alpha_1,\alpha_2,\cdots,\alpha_{n-1}$）で表すと，これは量子的な物理量を古典的な変数で記述することになる．この量子と古典のかけはしを具体的に実行する一般的な方法を次に説明する．

3.1.2 トロッター公式と ST 変換

前節に述べた 3 つの留意すべき条件をみたすように量子系の物理量を古典変数を用いて記述するために，次のいわゆるトロッター公式[10)]

$$
\mathrm{e}^{x(A+B)} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}B}\right)^n, \tag{3.4}
$$

または，拡張されたトロッター公式[12)]

$$
\mathrm{e}^{x(A_1+A_2+\cdots+A_r)} = \lim_{n\to\infty}\left(\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_1}\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_2}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{n}A_r}\right)^n \tag{3.5}
$$

を利用する[2)]．ここで，$A_1,A_2,\cdots,A_r$ は互いには非可換であっても，それぞれ個別には簡単に対角化可能であり，それらの指数関数 $\left\{\exp\left(\frac{x}{n}A_j\right)\right\}$ の行列要素も容易に求まるものとする．後で具体例でも示す通り，互いに非可換な演算子 $\mathscr{H}_1,\mathscr{H}_2,\cdots,\mathscr{H}_r$ の和からなるハミルトニアン

$$
\mathscr{H} = \mathscr{H}_1+\mathscr{H}_2+\cdots+\mathscr{H}_r \tag{3.6}
$$

に対して，この分け方をうまく工夫し，式 (3.3) の $T\left(\frac{x}{n}\right)$ にトロッター公式を適用して得られる表式を物理的視点から幾何学的に解釈すると[2)]，図 3.1 のよ

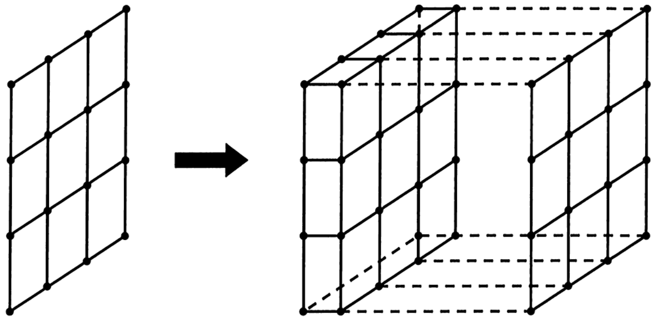


図 3.1　$d=2$ としたときの量子系とそれに対応する古典系．(a) 2 次元量子系，(b) 3 次元古典系．

うに，d 次元量子系が $(d+1)$ 次元古典系に変換されることになる[1]．この変換（等価性）は，しばしば **ST 変換**（**鈴木・トロッター変換**）と呼ばれ，多くの問題に応用されている[3~9]．

3.1.3　最初の適用例—量子スピン系

(i) 等価性研究の歴史的背景

筆者が大学院生時代に単独で書いた最初の頃の論文は，異なる 2 つの物理系（の問題）の間の数理的関係の研究に関するものであった．一つは，磁場のないスピン系の解から磁場のあるスピン系の解を求める公式に関するものである[15]．もう一つは，同一の物理系における異なる物理量の間の一般的な相関等式を見つけた論文である[16]．これは 2 頁足らずの短い論文であるが，部分的な自由度の消去など，今風に言えば「くり込み的な処法」に近い方法も使用されており，無数の相関等式が導入され，実に多くの研究に利用されている[17]．この流れの研究はその後もいつまでも続いている．

異なる 2 つのモデルの間の等価性にもいろいろと興味深いものが多い．例えば，図 3.2 に示すような 4 つのベクトルを状態変数に持つ系は，次の対応によって，2 つの独立なイジングスピン系 (S_i, S_i') と等価になる[18]：

$$\boldsymbol{e}_1 \leftrightarrow (1,1), \quad \boldsymbol{e}_2 \leftrightarrow (1,-1), \quad \boldsymbol{e}_3 \leftrightarrow (-1,1), \quad \boldsymbol{e}_4 \leftrightarrow (-1,-1). \tag{3.7}$$

すなわち，ベクトルポッツモデルの相互作用 $\mathscr{H}_{ij} = -J(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j)$ は，

$$-J(\boldsymbol{e}_i, \boldsymbol{e}_j) = -\frac{J}{2}(S_i \cdot S_j + S_i' \cdot S_j') \tag{3.8}$$

の関係式により，それは，2 つの独立なイジングモデルで表される．しかも，相互作用は元の系の相互作用の半分である．

このように異なる物理系の間の等価性が示されると，一方の系の性質から，それと等価なもう一つの系の物理的性質がわかることになり，大変便利である．しかし，多くの場合に，興味深い系は解析的に解くのが困難である．解けない

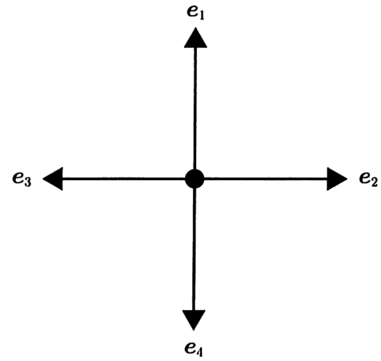


図 3.2　ベクトルポッツモデルの 4 状態 $\boldsymbol{e}_1, \boldsymbol{e}_2, \boldsymbol{e}_3$ および $\boldsymbol{e}_4$.

問題を解けない問題に変換して何の役に立つのかという批判もあった．ところで，今から半世紀前はちょうど電子計算機が開発され始めた頃であった．筆者は子供の頃からエレクトロニクスに興味があり，コンピューターの応用には強く心をひかれ，物理系のシミュレーションに興味を持っていたので，d 次元量子系と $(d+1)$ 次元古典系との等価性は，量子系を計算機でシミュレートするのに使えると思いついた[2~4]．こうして，量子モンテカルロ法の一般的定式化へと進んだ[2,4]．

(ii) 1 粒子量子系（0 次元）と 1 次元古典系との等価性

考え方の基本を説明するために，もっとも簡単な 1 粒子の問題を例として扱うことにする．しかも離散的表現に適したスピンを例に取り上げる．スピン $\frac{1}{2}$ に対応してパウリ行列 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ を扱うことにする．これらは，σ^z を対角化した表示を用いると，次の 2 行 2 列の行列で表される：

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{3.9}$$

また，これらは次の交換関係などをみたす：

$$\begin{aligned} &[\sigma^x, \sigma^y] = \sigma^x\sigma^y - \sigma^y\sigma^x = 2\mathrm{i}\sigma^z, \\ &\sigma^x\sigma^y = -\sigma^y\sigma^x, \quad \sigma^y\sigma^z = -\sigma^z\sigma^y, \quad \sigma^z\sigma^x = -\sigma^x\sigma^z \\ &(\sigma^x)^2 = (\sigma^y)^2 = (\sigma^z)^2 = E \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.10}$$

ただし，単位行列 E は物理では単に数字の 1 で表されることが多い．

これらのパウリ行列 $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ を用いて，1 粒子のハミルトニアン $\mathscr{H}_1$ が次のように与えられるものとする：

$$\mathscr{H}_1 = -\mu_{\mathrm{B}} H\sigma^z - \Gamma\sigma^x. \tag{3.11}$$

ただし，$\mathscr{H}$ は磁場を表し，Γ はスピン反転の効果を与える．これは 2 行 2 列のエ

ルミート行列であるから，容易に対角化でき，その固有値は $\pm\{(\mu_{\rm B}H)^2+\Gamma^2\}^{1/2}$ となる．したがって，(3.11) の状態和 $Z_1(\beta)$ は

$$Z_1(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}_1} = 2\cosh\left(\beta\sqrt{(\mu_{\rm B}H)^2+\Gamma^2}\right) \tag{3.12}$$

と与えられる．これをわざわざ一度量子系を古典系に変換する方法を用いて議論すると，$h_n = \frac{1}{n}\beta\mu_{\rm B}H$, $\gamma_n = \frac{1}{n}\beta\Gamma$ を用いて

$$\begin{aligned} Z_1(\beta) &= \lim_{n\to\infty} \mathrm{Tr}\ \left(\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}\right)^n \\ &= \lim_{n\to\infty} \sum_{\sigma_1=\pm1}\sum_{\sigma_2=\pm1}\cdots\sum_{\sigma_n=\pm1} \langle\sigma_1|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_1\rangle\langle\sigma_1|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_2\rangle \\ &\quad \times \langle\sigma_2|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_2\rangle\langle\sigma_2|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_3\rangle\cdots\langle\sigma_n|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_n\rangle\langle\sigma_n|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_1\rangle \end{aligned} \tag{3.13}$$

と書ける．ただし，$|\sigma_j\rangle$ は σ^z の（固有値が σ_j の）固有状態を表す：

$$\sigma^z|\sigma_j\rangle = \sigma_j|\sigma_j\rangle. \tag{3.14}$$

この表示では，$\exp(h_n\sigma^z)$ は対角成分のみを持つことを用いて，式 (3.13) の中間状態の数を $2n$ から n に半減させた．ここで，式 (3.13) の 2 種類の行列要素は容易に求まり，次のようになる：

$$\langle\sigma_j|\mathrm{e}^{h_n\sigma^z}|\sigma_j\rangle = \mathrm{e}^{h_n\sigma^j}, \quad \langle\sigma_j|\mathrm{e}^{\gamma_n\sigma^x}|\sigma_{j+1}\rangle = \left(\frac{\sinh(2\gamma_n)}{2}\right)^{1/2}\mathrm{e}^{K_n\sigma_j\sigma_{j+1}}. \tag{3.15}$$

$$\text{ただし，}K_n = \frac{1}{2}\log\coth\gamma_n. \tag{3.16}$$

こうして，1 粒子の状態和 $Z_1(\beta)$ は，次のように 1 次元イジングモデルの状態和に変換される：

$$Z_1(\beta) = \lim_{n\to\infty}\left(\frac{\sinh 2\gamma_n}{2}\right)^{n/2}\mathrm{Tr}\ \exp\left(h_n\sum_{j=1}^{n}\sigma_j + K_n\sum_j\sigma_j\sigma_{j+1}\right). \tag{3.17}$$

この量子古典変換によると，式 (3.11) の非対角要素（量子効果）は量子軸（ST 軸）方向の相互作用（式 (3.17) の指数の肩の第 2 項）で表される[19)]．このように，量子ゆらぎが古典的相互作用に変換されることは興味深いことである．次に示すように，一般の高次元量子系でも同様な変換が可能である．

(iii) d 次元量子系と $(d+1)$ 次元古典系の等価性[2~9)]

一般の d 次元で書き表すと表記が繁雑になるので，一般性を失うことなく，1 次元横磁場イジングモデル

$$\mathscr{H} = -J\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - \Gamma\sum_{j=1}^{N}\sigma_j^x = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}' \tag{3.18}$$

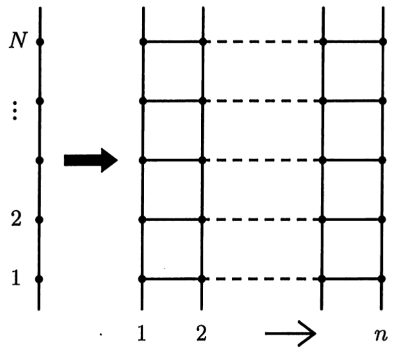


図 3.3　1 次元量子系に等価な 2 次元イジングモデル.

を用いて，**量子古典対応**を説明する．1 粒子の場合と比較して，対角成分の相互作用の項がそのまま加わるだけの違いで，数学的取扱いは，0 次元の場合と同じである．すなわち，1 次元横磁場イジングモデルの状態和 Z_{TI} は

$$
\begin{aligned}
Z_{\mathrm{TI}} &= \mathrm{Tr}\, \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}} = \lim_{n\to\infty} \mathrm{Tr} \left(\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{n}\mathscr{H}_0}\mathrm{e}^{-\frac{\beta}{n}\mathscr{H}'}\right)^n \\
&= \lim_{n\to\infty} \left(\frac{1}{2}\sinh\left(\frac{2}{n}\beta\Gamma\right)\right)^{Nn/2} \mathrm{Tr}\ \exp\left(-\beta\mathscr{H}_{\mathrm{Ising}}^{(n)}\right) \qquad (3.19)
\end{aligned}
$$

と 2 次元イジングモデルの状態和に変換される[2]．ただし，$\mathscr{H}_{\mathrm{Ising}}^{(n)}$ は，図 3.3 に示されるような有効相互作用を持つ **2 次元イジングモデル**である：

$$
-\beta\mathscr{H}_{\mathrm{Ising}}^{(n)} = \frac{\beta J}{n}\sum_{i,j}\sigma_{i,j}\sigma_{i+1,j} + \frac{1}{2}\log\ \coth\left(\frac{\beta}{n}\Gamma\right)\sum_{i,j}\sigma_{i,j}\sigma_{i,j+1}. \qquad (3.20)
$$

この等価な 2 次元ハミルトニアンをみると，**ST 軸**方向の有効相互作用は，Γ が大きくなるほど小さくなることがわかる．これは量子効果が強くなるとスピン反転が激しくなり，量子的な “乱れ”（量子ゆらぎ）が強くなって ST 軸方向には相関が弱くなることを示している．逆に，Γ が小さくなると ST 軸方向の相互作用 K_n は $-\frac{1}{2}\log\gamma_n$ に比例して大きくなる．同時に式 (3.19) の最初の因子が零に近づく．したがって，$n\to\infty$ $(\gamma_n\to 0)$ の極限のとり方には工夫が必要になる[20,21]．

また，上の **ST 変換**を利用すると 2 次元のオンサーガーの厳密解[22]を用いて 1 次元量子スピン系の解が求まることになる[1,2]．もちろん，この 1 次元量子スピン系のモデルは直接対角化して厳密に解くことができる[23]．両方のモデルの解法を比較すると，解法の数理的構造が極めて類似していることに気づいた人は多いであろう．これは，2 次元イジングスピン系の転送行列と 1 次元横磁場イジングモデルのハミルトニアンが，両方の相互作用の間の適当な関係式のもとに両者が可換になり，同時対角化可能となるという興味深い事実からも頷け

る[1]．さらに，上に述べた直接的な変換理論からもその妥当性が理解できる．

いずれにしても，異なる2つのモデルの等価性は物理系を横断的に扱うのに大変便利である．

3.1.4　量子モンテカルロ法の数理

以上の等価性の理論より，量子系に対しても古典系で開発された研究手法が適用できることになることがわかる[2~9]．特に，計算機シミュレーションの典型的な方法としてのモンテカルロ法が量子系で一般的に適用できることになり急激に量子系の計算機実験による研究が発展した[2~9]．

量子系が古典系に等価になるといっても，最初から古典系を記述するために導入されたモデルとは本質的に異なるところもあることに注意しなければならない[2~9]．そうでなければ，量子系と古典系の質の違いが計算機実験では見出せないことになってしまう．古典表示で変換された系の特徴を列挙すると次の通りである：

- もとの量子系の相互作用の対称性が古典系でも形を変え保持されている．例えば，ハイゼンベルグモデルの相互作用

$$-J(\boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{S}_j) = -J\left(S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z\right) \tag{3.21}$$

  はスピン空間で回転対称性（すなわち O(3) 対称性）を持っている．したがって，これを古典表示すると，その対称性を反映した特殊な4体力相互作用となる[2]．
- 全スピン保存の系では，それに対応して古典系のスピン変化を上向き（または下向き）のスピンだけに着目して調べることができる（これは「世界線の方法」と呼ばれる）[8,9]．

本節では，量子系を古典系で表示する一般的な方法論を説明し，量子スピン系で具体的にその本質を解説した．この量子古典対応の重要な活用方法として，量子モンテカルロ法の数理を解説した．その解析的な応用例や近似計算の精度を上げる高次分解公式などに関しては次章で解説する．

3.2　量子転送行列法

量子古典対応[2]の解析的な応用の重要な例としては，量子転送行列法[20,21,24,25]をあげることができる．これは量子系を古典系に変換して，古典系でよく知られている転送行列法をこの **ST 変換**された系に適用するというもので，一見平凡な方法に見えるかもしれない．確かに，もとの格子空間（これを実空間と呼ぶ）を転送行列の定義空間とすると，もとの量子系のハミルトニアンが転送行列として現れるだけで，問題は解決されない．ところが後で詳しく述べるように，

視点を変えるだけで事態は一変するのである．すなわち，**ST 軸**（量子軸または虚時間軸とも呼ばれる）方向の空間を転送行列の定義空間とすることにより，無限個の固有値を求める代わりに 1 個の（最大）固有値を求めるだけで，系の自由エネルギーなどの熱力学的な物理量が求まることになる[24)]．言うなれば，

「横のものを縦にするだけで新しい道が拓けることもある」

のである．今から約 30 年前に，このアイデアを東大の研究室で説明しても，なかなかこの方法の有効性を実証してみようという院生が現れず，講義などの合間に独りで研究しているうちに時間が過ぎていったが，やがて新しい院生が興味を持ち始め，明るい見通しがついてきて，今も発展し続けている[20, 21, 25, 26)]．

3.2.1　量子転送行列法とその有効性

前節で説明した ST 変換[2)]により，d 次元量子系を $(d+1)$ 次元古典系に変換し，その古典系の ST 軸方向の空間で転送行列 $\mathscr{T}_n$ を定義する[24)]．わかり易くするため，図 3.4 のように，1 次元量子スピン系を 2 次元イジングスピン系に変換した例[20, 21)]で説明する．

統計力学において基本的な物理量である状態和 $Z_m(\beta)$ は

$$Z_m(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}; \quad \beta = \frac{1}{k_\mathrm{B}T} \quad (T \text{ は系の温度}) \tag{3.22}$$

と定義される．ただし，m は系のサイズを表す．

さて，変換された古典系の **ST 軸**（縦の任意の 1 列）の格子点の情報を右隣に伝える行列として**量子転送行列** $\mathscr{T}_n$ が定義される．したがって，左端から右端まで情報を伝える操作は，サイズ m の系では，$\mathscr{T}_n^m$ で表される．系の状態和 (3.22) は，この情報伝達の総和であるから，量子転送行列 $\mathscr{T}_n$ を用いて

$$Z_{m,n}(\beta) = \mathrm{Tr}\ \mathscr{T}_n^m \tag{3.23}$$

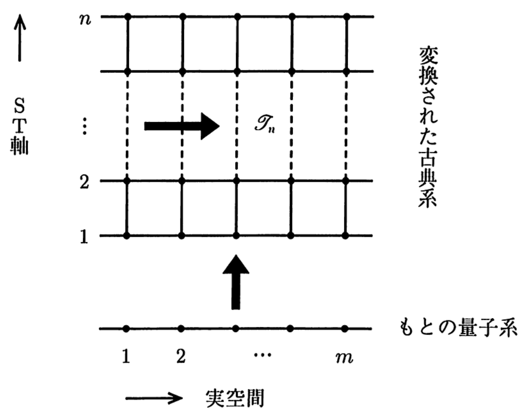


図 3.4　ST 変換された古典系の ST 軸上で定義される量子転送行列．

の $n \to \infty$ の極限として与えられる．

通常の統計力学の手順では，系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ をまず対角化し，その固有値 $\{E_j\}$ をすべて求め，

$$Z_m(\beta) = \sum_{j=1}^{\text{all}} \mathrm{e}^{-\beta E_j} \tag{3.24}$$

のように，すべての固有値に関する和を求めなければならない．通常は，固有値をすべて求めるのは困難であり，たとえ近似的にでも求まったとしても，それらを式 (3.24) のように指数の肩に乗せて和をとるのも大変である．

これらの事情を踏まえて，式 (3.23) を求める手順について考察する．解析的な手順としては，やはり量子転送行列 $\mathscr{T}_n$ の固有値 $\{\Lambda_j(n)\}$ を求めて

$$Z_{m,n}(\beta) = \sum_{j=1}^{\text{all}} \Lambda_j^m(n) \tag{3.25}$$

のようにすべての固有値 $\{\Lambda_j\}$ に関する和をとることになる．このままでは，横のものを縦にしただけで何のご利益もなさそうに思われるであろう．横のものを縦にもしないものぐさの院生でも一瞬のうちに頭の中でこのくらいのところまでは考える．問題はこの先にある．数学の定義通りの手順では，ST 軸の長さ n をまず ∞ にしてから，**熱力学的極限**（系のサイズ m を ∞ にする極限）をとることになる．昔，もし，この 2 つの極限を逆にとることが可能だとしたらどうなるであろうかと筆者は考えたところ，もとの系の相互作用が短距離力のときは，この「**極限操作交換定理**」が，後に示すように，成り立つことがわかった[24]．そこで，この定理に基づいて，まず，熱力学的極限を先にとることにする．状態和 $Z_{m,n}(\beta)$ 自体は ∞ になってしまうので，統計力学では，自由エネルギー（漸近的に格子点の総数 m^d に比例する量—示量的な量）

$$F_m = -k_\mathrm{B} T \log Z_m(\beta) \tag{3.26}$$

に対応して，粒子 1 個当りの自由エネルギー（の $-\beta$ 倍）

$$f_{m,n} = \frac{1}{m^d} \log Z_{m,n}(\beta) \tag{3.27}$$

を扱う．その $m \to \infty$ の極限は，図 3.4 の例 $(d = 1)$ では

$$\begin{aligned} f_n &= \lim_{m\to\infty} \frac{1}{m} \log \left\{ \Lambda_{\max}^m(n) \left(1 + \sum_{j\neq \max} \left(\frac{\Lambda_j(n)}{\Lambda_{\max}(n)} \right)^m \right) \right\} \\ &= \lim_{m\to\infty} \frac{1}{m} \log \Lambda_{\max}^m(n) = \log \Lambda_{\max}(n) \end{aligned} \tag{3.28}$$

となり，何と最大固有値 $\Lambda_{\max}(n)$ 1 個で自由エネルギーが与えられることになる．これは，式 (3.24) のように無限個の固有値を用いた定式化と比べて大変優れている．量子転送行列の最大固有値を与える状態は，通常は基底状態に対応

するので，1 次元量子スピン系の $\Lambda_{\max}(n)$ はベーテ仮設法[27]によって求めることができる．実際，クリュンパー[26]（A. Klümper）は，この量子転送行列法の定式化を用いて $\Lambda_{\max}(\infty)$ に関する閉じた積分方程式を求めることに成功した．ただし，ここでは，その方程式は複雑なので省略する．

3.2.2 極限操作交換定理[24]

前項で説明した量子転送行列が有効に活用できるのは，次の定理のお陰である．

定理 3.1（極限操作交換定理[24]） 次の 3 つの極限を考える：

$$\lim_{m\to\infty}\lim_{n\to\infty} f_{m,n} = f, \quad \lim_{n\to\infty}\lim_{m\to\infty} f_{m,n} = \tilde{f} \tag{3.29}$$

および，2 重極限

$$\lim_{\substack{m\to\infty \\ n\to\infty}} f_{m,n} = \hat{f}. \tag{3.30}$$

系の相互作用が短距離力であれば，上の 3 つの極限 f, $\tilde{f}$, $\hat{f}$ はそれぞれ存在し，互いに一致する：

$$f = \tilde{f} = \hat{f}. \tag{3.31}$$

証明[24] 証明の本質は，一般の d 次元でも，また短距離力であれば少し広がりのある力でも同じであるから，ここでは $d=1$ とし，最近接相互作用の場合についてのみ証明していく[24]．次のように証明を 3 つのステップに分けて考える[24]．
ステップ 1：まず，$f_{m,n}$ の $m\to\infty$ に関する一様収束性を証明する．図 3.5 のように，サイズ $m'=2m$ の系を 2 つに分離し，その間の相互作用の大きさを J とする．

熱力学的極限の存在を証明するとき[28]と同様に，今の問題では ST 変換された古典系の相互作用が実空間方向は $\frac{J}{n}$ になるだけであるから，次の不等式が成り立つことが容易にわかる：

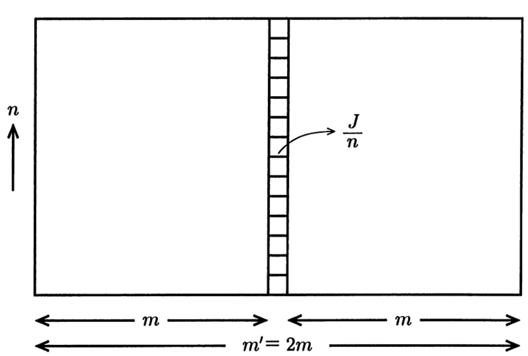


図 3.5 **ST 変換**された古典系におけるサイズが異なる場合に対する規格化された自由エネルギー（の $-\beta$ 倍）$f_{m,n}$ と $f_{m',n}$ との間の不等式を探す[24]．

$$|f_{m',n} - f_{m,n}| \le \frac{1}{m'}\frac{|J|}{n}n = \frac{|J|}{m'} = \frac{|J|}{2m}. \tag{3.32}$$

この不等式を p 回繰り返し用いると，サイズ $m'' = 2^p m$ とサイズ m との間の自由エネルギーの間には次の不等式が導ける．すなわち，任意の正の整数 m, n および p に対して次式が成り立つ：

$$\begin{aligned} &|f_{m'',n} - f_{m,n}| \\ &\le |f_{2^p m,n} - f_{2^{p-1}m,n}| + |f_{2^{p-1}m,n} - f_{2^{p-2}m,n}| + \cdots + |f_{2m} - f_m| \\ &\le \frac{|J|}{m}\left(\frac{1}{2^p} + \frac{1}{2^{p-1}} + \cdots + \frac{1}{2}\right) \le \frac{|J|}{m}. \end{aligned} \tag{3.33}$$

こうして，n によらず，$N_1 = \frac{|J|}{\varepsilon}$（$\varepsilon$ は任意の正実数）より大きい任意の m, m' に対して次の不等式が成り立つことがわかった：

$$|f_{m,n} - f_{m',n}| < \varepsilon. \tag{3.34}$$

ゆえに，次の一様収束性が示せた：

$$\lim_{m\to\infty} f_{m,n} = \tilde{f}_n \quad (\text{一様}). \tag{3.35}$$

<u>ステップ2</u>：一方，極限 $n \to \infty$ を先にとると，トロッター公式の収束性に関する不等式[24]を用いて容易に，次式で定義される f_m が存在する：

$$\lim_{n\to\infty} f_{m,n} \equiv f_m. \tag{3.36}$$

しかも，この $m \to \infty$ の極限 f の存在は通常の熱力学的極限の存在の証明により[30]保証されている：

$$\lim_{m\to\infty} f_m = f. \tag{3.37}$$

そこで，次に式 (3.35) の右辺 $\tilde{f}_n$ の $\tilde{f}$ への収束および等式 $\tilde{f} = f$ の証明を行う．まず次の補題を紹介する．

補題 3.1　次の 2 つの極限

$$\lim_{n\to\infty} a_{m,n} = \alpha_m \ (\text{すべての } m \text{ に対して}),\ \text{および} \lim_{m\to\infty} \alpha_m = \alpha \tag{3.38}$$

が存在して，かつ次の極限

$$\lim_{m\to\infty} a_{m,n} = \beta_n \tag{3.39}$$

が一様収束ならば（n によらず一様に収束するならば），$\{\beta_n\}$ の極限が存在して，それは α に等しい：

$$\lim_{n\to\infty} \beta_n = \alpha. \tag{3.40}$$

これを用いると，$\tilde{f}_n$ は $n \to \infty$ で $\tilde{f}$ に収束し，等式 $\tilde{f} = f$ が成り立つこと

が証明される．

さて，蛇足ではあるが，ついでにこの補題の証明も簡単なので書いておくことにする．式 (3.38) より，m を固定しておくと，任意の正の ε と整数 $n > N_1$ に対して

$$|a_{m,n} - \alpha_m| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{3.41}$$

が成り立つ．また，式 (3.38) の第 2 式より，任意の整数 $m > N_2$ に対して

$$|\alpha_m - \alpha| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{3.42}$$

が成り立つ．同様に $m > N_3$ に対して

$$|a_{m,n} - \beta_n| < \frac{\varepsilon}{3} \tag{3.43}$$

が成り立つ．したがって，任意の $n > N_1$ と任意の $m > \max(N_2, N_3)$ に対して

$$|\beta_n - \alpha| < |\beta_n - a_{m,n}| + |a_{m,n} - \alpha_m| + |\alpha_m - \alpha| < \varepsilon \tag{3.44}$$

となり，補題が示せた．

<u>ステップ **3**</u>：不等式 (3.44) で，$a_{m,n} = f_{m,n}$, $\beta_n = \tilde{f}_n$, $\alpha = f = \tilde{f}$ とおくと，任意の $m, n > N$ に対して不等式

$$|f_{m,n} - \tilde{f}| \leq |f_{m,n} - \tilde{f}_n| + |\tilde{f}_n - \tilde{f}| < \frac{\varepsilon}{3} + \varepsilon < \frac{4}{3}\varepsilon \tag{3.45}$$

が成り立つから，2 重極限 $\hat{f}$ が存在し，次の重要な等式

$$\hat{f} = \tilde{f} = f \tag{3.46}$$

が証明できた．

この等式の証明を詳しく説明したのは，証明自体に ST 変換の特徴がよく反映されていると同時に，それは量子転送行列の有効性を保証する重要な基礎となる定理を与えるからである[24]．

ついでながら，最大固有値の次の固有値 Λ_{next} が求まると，実空間方向のスピン相関関数 $C(R) \equiv \langle \sigma_i^z \sigma_{i+k}^z \rangle$ および**相関距離** ξ が次の公式によって与えられる[20,21]：

$$C(R) \sim \frac{\exp(-\frac{R}{\xi})}{R^{d-2+\eta}} \quad \text{および} \quad \frac{1}{\xi} = -\lim_{n\to\infty} \log\left|\frac{\Lambda_{\text{next}}}{\Lambda_{\max}}\right|. \tag{3.47}$$

したがって，臨界点や 1 次元基底状態などでは，Λ_{next} が $\Lambda_{\max}$ と一致し，$\xi \to \infty$ となり，**相関関数**は巾則にしたがう：

$$C(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}}. \tag{3.48}$$

平均場近似の理論である**オルンシュタイン・ゼルニケ理論**からのずれを表す臨

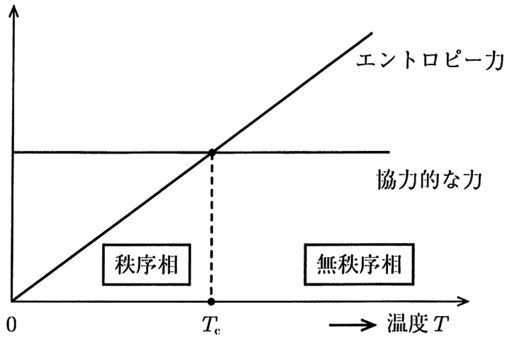


図 3.6　温度によらない協力的な力（相互作用）と（温度と共に大きくなる）エントロピー力が釣り合ったところ T_c で相転移が起こる．

界指数として η がフィッシャーによって導入された．上の ξ の公式を用いて，1 次元スピン系の相関関数が多くの人によって研究されている[20,21,25,26]．

3.2.3　古典転送行列から量子転送行列への発展史

熱平衡状態での相転移現象などの一般的な協力現象[31]を扱う際には，協力的な力とその効果を乱す熱的なゆらぎ（エントロピー効果，筆者が 1978 年ブラッセルで開催されたソルベイ会議の講演であえて「エントロピー力」と呼んで以来，プリゴジンら多くの人が，本当は力ではないのに，この名称を使うようになった）の絡み合いが重要である．これら両者の釣り合ったところで図 3.6 のように相転移が起こる[31]．

秩序相では，いったんどこかでたまたま局所的に秩序（order）ができると，他のところにもこの効果が伝わっていく．ゼルニケは，この現象を

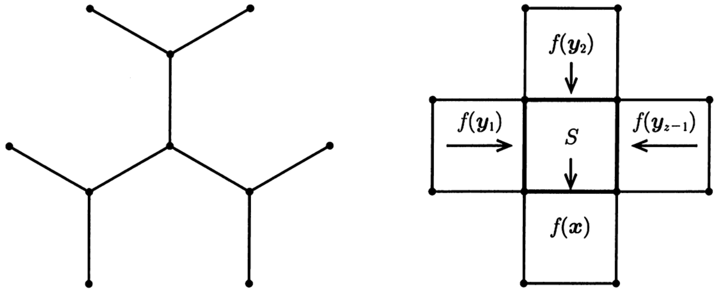
"propagation of order"（秩序の伝ぱん）

として捉えて，相関関数を導入して理論的に議論した．これらは転送行列の方法の萌芽となったと考えられる．ゆらぎも含めた秩序状態が 1 つの列（面）から次の列（面）へと伝ぱんする状況を表す演算子が，とりも直さず，転送行列である[29~31]．この意味で，転送行列のアイデア[29,30]は統計力学の問題を情報理論と関連づけて扱う最近の潮流[33]の草分けと言ってもよいかもしれない．

量子転送行列のアイデア[20,21,24,25]は，この古典系の統計力学の情報的取扱いである転送行列の概念を量子系に拡張したものと位置づけることができる．これからの発展・応用が期待される．

3.2.4　転送行列法と有効場理論—合流型転送行列の導入

すでに述べた通り，転送行列は統計力学の解析的方法として極めて強力な武器である．この方法が量子系にまで拡張され，量子転送行列として発展しつつある現在，この転送行列法と有効場理論[34]やくり込み群[35]との関係[36~38]にここ



(a) ケーリートリー
(ベーテ格子，$z = 3$)

(b) クラスターケーリートリー
($z = 4$)

図 3.7　クラスターケーリートリーと合流型転送行列[37]．

でふれておくことも有益であろう．これらはまた，相関等式[16,17]とも深く関係している．

要するに，有効場理論[34,36]では，着目する以外のスピンや粒子以外の自由度については先に消去してその効果を有効的に着目する自由度に有効場として働きかける．くり込み群の理論[35]では，有効場を少しずつ漸化的に取り込む．転送行列では，厳密に有効場を構成していく．したがって，1 次元イジング模型のように厳密に解ける系では，上記 3 つの方法はどれも厳密に実行することができ，厳密に解くことが可能となる．すなわち，これら 3 つの方法は，少なくとも 1 次元系では等価である[38]．それは，1 次元系では，情報の伝わり方が極めて単純だからである．転送行列法でも有効場理論でもくり込み操作でも全く共通のことをやっていることになる．

今までの転送行列法では，情報の取扱いが線形である．これらを非線形に拡張したものが筆者の提唱した合流型転送行列 (confluent transfer matrix) である[37]．図 3.7 のように，通常のケーリートリーの各格子点を研究対象とする格子のクラスターに置き換え，着目するクラスター S に接続する辺（または面）$1 \sim (z-1)$ までの状態 $\boldsymbol{y}_1, \boldsymbol{y}_2, \cdots, \boldsymbol{y}_{z-1}$ に対応する分布関数 $f(\boldsymbol{y}_1), f(\boldsymbol{y}_2), \cdots, f(\boldsymbol{y}_{z-1})$ を考える．残りの辺（または面）の分布関数 $f(\boldsymbol{x})$ は，クラスター S の境界条件 $\{f(\boldsymbol{y}_j)\}$ が与えられたとき，S 面のゆらぎがカノニカル分布（またはボルツマン分布）しているとして，クラスター S に対応する合流型転送行列 $\mathscr{T}$ を用いて

$$f(\boldsymbol{x}) = \mathrm{Tr}_{\{\boldsymbol{y}_j\}} S(\boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}_1, \cdots, \boldsymbol{y}_{z-1}) f(\boldsymbol{y}_1) \cdots f(\boldsymbol{y}_{z-1}) \equiv \mathscr{T} f(\boldsymbol{y}_1) \cdots f(\boldsymbol{y}_{z-1})$$

の形に与えられる[37]．この非線形方程式を解くことにより，固有関数 $f(\boldsymbol{x})$ を求めれば，クラスター S に対応するもとの系での，状態 $\boldsymbol{x}$ で指定される任意の物理量 $Q(\boldsymbol{x})$ のカノニカル平均は

$$\langle Q(\boldsymbol{x}) \rangle = \frac{\mathrm{Tr}\ Q(\boldsymbol{x}) f^2(\boldsymbol{x}) D(\boldsymbol{x})}{\mathrm{Tr}\ f^2(\boldsymbol{x}) D(\boldsymbol{x})} \tag{3.49}$$

で与えられる[37]．ただし，$D(\boldsymbol{x})$ は状態 $\boldsymbol{x}$ に対するボルツマン因子を表す．

この合流型転送行列の特徴は，その非線形性のために，有限のクラスター S に対しても，ベーテ近似のように相転移が一般に起こる．しかも，クラスター S のサイズを大きくするにつれて，系のゆらぎの効果がますます正しく取り入れられるようになり，相転移点 T_c も正しい相転移点 T_c^* に近づく．この系統的な平均場近似列に CAM 理論[36)]を適用することにより，非常に精度の高い非古典的な臨界指数が得られる[39)]．

この理論で $z=2$ とおくと通常の転送行列になる．こうして，厳密に解ける（本質的に）1 次元的な系では，転送行列法と有効場理論が合流型転送行列の理論を通して等価であることが理解される．また，合流型転送行列の作り方からわかる通り，**実空間くり込み操作**とも対応していることがわかる．また，これは，最近よく用いられるテンソル積表示の源流ともみなせる．

次章からは，手順の分離と統合について，指数積分解公式の一般論を中心に詳しく解説する．

参考文献

1) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971).
2) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976), および鈴木増雄：『統計力学』（現代物理学叢書）（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）.
3) 大貫義郎，鈴木増雄，柏太郎：『経路積分の方法』（現代物理学叢書）（岩波書店，2012 年 6 月再版）の第 6 章「代数的一般化」参照.
4) M. Suzuki, ed: *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Systems*, Springer-Verlag (1987).
5) B.K. Chakrabarti, A. Dutta and P. Sen: *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Model*, Springer (1996).
6) 鈴木増雄：『活力を与える「物理」』（オーム社，2007），第 6 章「拡張・変換の視点で限界・困難を乗り越える」参照.
7) M. Suzuki, *Quantum-Classical Statistical Physics Correspondence*: 5$^{\text{th}}$ Ramanujan Lecture 2010 (25$^{\text{th}}$ November, 2010, Kolkata, India).
8) M. Suzuki, S. Miyashita and A. Kuroda, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 1377 (1977).
9) H. De Raedt and A. Lagendijk, *Phys. Rep.* **127**, 233 (1985); H. De Raedt and K. Michielsen, *Ann. Phys.* **4**, 679 (1995).
10) H.F. Trotter, *Proc. Am. Math. Phys.* **10**, 545 (1959).
11) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **21**, 2274 (1966).
12) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **57**, 193 (1977).
13) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 319 (1990); ibid. **165**, 387 (1992); *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991); *Physica A* **191**, 501 (1992); ibid. **194**, 432 (1993); ibid. **205**, 65 (1994).
14) E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration*, Springer (2006), およびその引用文献参照.
15) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **18**, 233 (1965).
16) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
17) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **16**, 1749 (2002), およびその引用文献参照.
18) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **37**, 770 (1967).
19) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2017 年第 3 刷）；「パリティ」2012 年 4 月号より 2013 年 5 月号までの連載記事.
20) M. Suzuki and M. Inoue, *Prog. Theor. Phys.* **78**, 787 (1987).
21) M. Inoue and M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **79**, 645 (1988).
22) L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
23) S. Katsura, *Phys. Rev.* **127**, 1508 (1962).
24) M. Suzuki, *Phys. Rev. B***31** 2957 (1985), および M. Suzuki, *Physica A***321**, 334

(2003).
25) A. Sugiyama, H. Suzuki and M. Suzuki, *Physica A***353**, 271 (2005).
26) A. Klümper, *Z. Phys. B***91**, 507 (1993).
27) H.A. Bethe, *Z. Phys.* **71**, 205 (1931).
28) R.B. Griffiths, in *Phase Transition and Critical Phenomena*, edited by C. Domb and M.S. Green (Academic Press, New York, 1972).
29) H.A. Kramers and G.H. Wannier, *Phys. Rev.* **60**, 252 (1941).
30) 久保亮五，物性論研究 **1**, 1 (1943)，および本人による英訳 in Selected Papers of Professor Ryogo Kubo (Syokabo, Tokyo, 1980) edited by M. Suzuki *et al.* この論文は第 2 次戦時中に書かれたものであり，文献 29) とは全く独立に発想されたものである．論文のタイトルも「統計力学における一つの解析的方法」という魅力的なものであって，1 次元イジング模型は 2 行 2 列の行列の対角化で厳密に解けて相転移が有限温度では起こらないことが示されている．2 次元では固有値の縮退が起こり得ると予想し，有限温度での相転移のメカニズムを説明している．1944 年の有名なオンサーガーの厳密解にもう一歩というところまで近づいた記念すべき論文である．日本語の論文のため，外国ではあまり知られていないのは残念である．
31) 鈴木増雄，『統計力学』(岩波書店，2000)，岩波オンデマンドブックス (2016 年 1 月).
32) F. Zernike, *Physica* **7**, 565 (1940).
33) H. Nishimori, *Statistical Physics of Spin Glasses and Quantum Information* (Cambridge University Press, Cambridge, 2000) および西森秀稔，『スピングラス理論と情報統計力学』(岩波書店，1999).
34) H.A. Bethe, *Proc. R. Soc. London A***150**, 552 (1935).
35) K.G. Wilson, *Phys. Rev. B***4**, 3174, 3184 (1971).
36) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **55**, 4205 (1986), ibid. **57**, 2310 (1988).
37) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 3642 (1989).
38) 高安亮子，東京理科大学理学研究科物理学専攻修士論文 1204630 (指導教員：鈴木増雄).
39) M. Suzuki, M. Katori and X. Hu, *J. Phys. Soc. Jpn.* **56**, 3092 (1987)
40) M. Suzuki and X. Hu, M. Katori, A. Lipouski, N. Hatano, K. Minami and Y. Nonomura, *Coherent Anomaly Method—Mean Field, Fluctuations and Systematics* (World Scientific, Singapore, 1995).

第 4 章
手順の分離と指数積公式

4.1 手順の分離と漸化式の方法による高次分解

前章までは，最先端における物理の研究成果にまで踏み込んで解説してきたので，専門外の読者には難解な部分もあったのではないかと危惧している．これから，一般的な数学的処法である指数積公式と量子解析の話に入っていきたい．その導入として，「**手順の分離と統合**」という考え方[1]を紹介する．わかり易くするため，まず魔方陣[2]を例に説明する．次に，非可換な演算子 A と B の和の指数演算子の分解公式に関して詳しく解説する．

4.1.1 手順の分離による魔方陣の解き方

昨年の 9 月にギリシャのロドス島で開催された数値解析・応用数学の国際会議（ICNAAM 2014）に参加し，本章のテーマである「指数積と量子解析」のミニシンポジュームを主催した．この分野の著名な研究者（写真 4.1 参照）と交流を深めることができ，大変有意義な会であった．会議前日にロドス島の旧市街地，特にピタゴラス通りやソクラテス通りを歩きながら数学や科学の歴史に思いを馳せた．筆者の都立白鴎高校時代には，女子高生に「ソクラテス」と渾名をつけられ，数学のとき以外は敬遠されていたことなどを懐しく思い出した（その当時は，数学者になることを夢みていた）．

会議の後に，アテネに 3 日ほど滞在し，アクロポリスの丘に登り，古代ギリシャの遺跡群を見て回った（写真 4.2 参照）．その際，それまであまり関心のなかった魔方陣を考えたくなった．それは心のゆとりであろうか．この問題には古い歴史があり，解説書も多くあるだろうと想像できた[2]．しかし，何となくルールは知っていたので，まずは何も調べずに自分で初めから考えてみることにした．本を読んで解き方を知ると，それだけ自分で考える楽しみが減ってしまうからである．

最初に図 4.1 のような 3×3 の魔方陣の解き方を考える．

まず，1 から 9 までの自然数を奇数 1, 3, 5, 7, 9 のグループと偶数 2, 4, 6,



写真 4.1　文献 3) の著者のうちの E. Hairer 教授(左)，G. Wanner 教授(右)と．

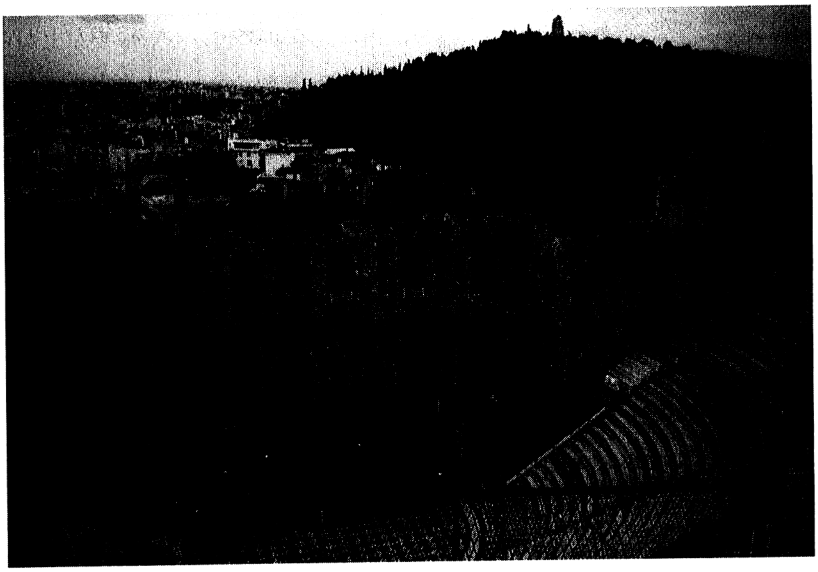


写真 4.2　アテネのアクロポリスの丘からの眺め．手前は古代劇場（筆者撮影）．

8 のグループに分ける．各列の和は $(1+2+\cdots+9)/3=15$ であることがわかり，これは奇数であるから，図 4.1 (a) のように，各列に△は奇数個（1 個または 3 個）配列することになる．これが，この問題の最初の手順の分離である．すなわち，図 4.1 (b) のように十字の 5 つの枡目に 1, 3, 5, 7, 9 の 5 個の奇数を配列して，縦と横の列の和がそれぞれ 15 になるようにする問題をまず考える．これは簡単に解ける．すなわち，15 を 3 つの異なる奇数の和で表すと，$15=7+5+3=9+5+1$ という 2 種類に限られることがわかる．この分解では奇数 5 は 2 回現れるので図 4.1 (b) の中央の数が 5 となる．図形を 90° 回転し

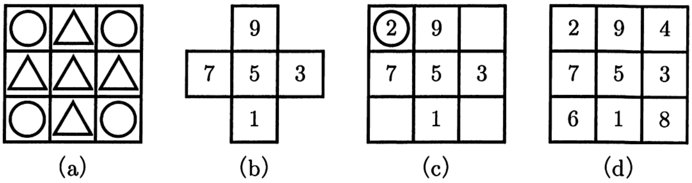


図 4.1　3 × 3 の魔方陣．(a) 奇数 1, 3, 5, 7, 9 を△印で表し，偶数 2, 4, 6, 8 を○印で表す．(b) 奇数の配置．(c) まず，2 の位置が決まる．(d) 最終図．

て重なるものや反転して同じになるものは同一の魔方陣とみると，奇数 9 はどこにおいてもよいことになり，図 4.1 (b) のように上の枡目に 9 を配置しても一般性を失わない．こうして，図 4.1 (b) のような配列が解となることが容易にわかる．これが第 2 の手順の分離である．よって，5 個の奇数の配列は図 4.1 (b) のようになる．偶数 2, 4, 6, 8 を残りの枡目にはめ込むのは容易である．まず，一番小さい偶数 2 は，2 つの大きな奇数 7 と 9 の隣の角に来る（図 4.1 (c)）．その後は，芋蔓式に決まり，図 4.1 (d) の魔方陣となる（または，15 を 2 を含む偶数 2 個と奇数 1 個で表すと，$15 = 2 + 7 + 6 = 2 + 9 + 4 = 2 + 5 + 8$ となることを用いてもよい）．実は，未知数 $x_1, \cdots, x_9$ を左上から順に割り当て，条件式を作ると，連立方程式の数が 8 個となり，不定方程式となってしまい，そのままでは解けない．中央の数が対称性から考えて 5 であるとすると連立方程式の数が 8 個となり，未知数の数と一致する．しかし，8 個の方程式は互いに独立ではない（係数行列の行列式が零になる）ため，まだ不定である．このように，魔方陣を代数的に解くのは面倒である．魔方陣の問題は，うまい工夫をすることによって解けるところに，古来から多くの人々[2)]をとりこにしてきた魅力がある．

物理の研究でも，同様の戦略でうまくいくことがある．理論の場合には実験設備も必要ないので，あまり時間をかけて先行研究があるかどうか調べて労力を費やさず，まず自分のアイデアを育て発展させて結果を出してみるのもよい．それから同じ研究があるかどうか調べるのも一つの有効な方法である．私はこの方法を好んで用いている．たとえ，先行研究に似たようなものがあっても自分の研究成果と全く同じということは少ないものである．

こうして研究を進め，新しいところのみ論文にすればよい．これでは一見研究の無駄が多いように思われるかもしれないが，そもそも研究には無駄やリスクは付きものである．

さて，よりサイズの大きい魔方陣になるとますます解き方は複雑になる．サイズが奇数の場合には，上に用いた方法が容易に拡張できる（奇数・偶数分離魔方陣[2)]）．

さらに，特殊な $3^n \times 3^n$ $(n = 1, 2, 3, \cdots)$ の**魔方陣**は 3 × 3 の魔方陣と類似の法則が存在して興味深い[2)]．

実は，後で詳しく解説する高次の指数積公式[4~10)]を漸化式の方法で一般的に無限次まで構成する筆者の理論[4~6)]と上の魔方陣の構成法とは考え方に関して

類似していることを強調しておきたい．

4.1.2 フォッカー・プランク方程式のリー代数的解法と手順の分離

ここでは，物理現象を例にして「手順の分離」の考え方を説明しよう．通常の力学で扱うニュートンの法則には時間の 2 階微分しか現れないので，基礎方程式は時間反転に対して対称的である．しかし，現実の体系は速度（時間の 1 階微分）に比例する摩擦抵抗などを受けるので，体系を記述する基礎方程式は（以前に変分原理の解説でふれたように），時間反転対称性を破る項を含む．このような系では，不可逆的な現象が起こる．ブラウン粒子の速度のような着目する変数を x として，それが 1 次元的に拡散する現象は，時刻 t で変数 x をとる確率分布 $P(x,t)$ に対するフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -\gamma\frac{\partial}{\partial x}(xP) + \varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}P \tag{4.1}$$

で記述される．ただし，上式の右辺第 1 項はドリフト項と呼ばれ，変数 x の時間変化が $-\gamma x$ に比例してドリフトする効果を表す．第 2 項は拡散定数を ε とする**拡散効果**を表す．式 (4.1) は形式的には，2 つの微分演算子

$$A = -\gamma\frac{\partial}{\partial x}x,\ \text{および}\ B = \varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{4.2}$$

を用いて

$$\frac{\partial P}{\partial t} = (A+B)P \tag{4.3}$$

と書ける．この方程式の形式的な解は，指数演算子を用いると

$$P(x,t) = \mathrm{e}^{t(A+B)}P(x,0) = \mathrm{e}^{tA+tB}P_0(x) \tag{4.4}$$

と表される．すなわち，初期分布 $P_0(x)$ $(= P(x,0))$ がわかれば，原理的に任意の時刻の分布関数 $P(x,t)$ が求まることになる．問題は，この指数演算子をいかに取り扱うかである．2 つの演算子は互いに可換でない（非可換である）ため，2 つの積 $\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ に分けることができない．仮に 2 つの指数積に分解できるとすれば，事は簡単である．なぜならば，指数演算子 e^{tA} と e^{tB} の効果はそれぞれ次の公式

$$\exp\left(-\gamma(t)\frac{\partial}{\partial x}x\right)P(x) = \mathrm{e}^{-\gamma(t)}P\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\right) \tag{4.5}$$

および

$$\exp\left(\varepsilon(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x) = \{4\pi\varepsilon(t)\}^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(x-y)^2}{4\varepsilon(t)}\right]P(y)dy \tag{4.6}$$

を用いて容易に処理できるからである[11)]．すなわち，A の効果は，式 (4.5) からわかる通り，初期分布を変数変換するだけで表される．例えば，$t=0$ で $x=x_0$

とすると，$P_0(x)=\delta(x-x_0)$ となり，A による $P_0(x)$ の時間変化は

$$\mathrm{e}^{tA}P_0(x)=\mathrm{e}^{-\gamma(t)}P_0\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\right)=\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\delta\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}-x_0\right)=\delta\left(x-x_0\mathrm{e}^{\gamma(t)}\right) \tag{4.7}$$

と与えられる．ただし，$\delta(x)$ はデルタ関数である．時刻 t で $x=x_0\mathrm{e}^{\gamma(t)}$ にドリフトするだけである．分布の形は本質的に変わらない．次に B の効果は，式 (4.6) からわかる通り，幅 $\varepsilon(t)$ で分布が広がっていく拡散現象を与える．

実は大変興味深い関係が A と B の間に存在する[11]．それは，A と B の変換関係が次のように B だけで表されるということである：

$$[A,B]=\alpha B;\quad \alpha=2\gamma. \tag{4.8}$$

すなわち，$\{A,B\}$ は 2 次元リー代数を構成している．この事実に着目し，後で述べる量子解析を用いると，指数演算子 $\mathrm{e}^{t(A+B)}$ は次のように簡単な指数積に分解できる[11]：条件式 (4.8) の下に，任意の λ に対して

$$\mathrm{e}^{t(A+B)}=\mathrm{e}^{\lambda\nu(\alpha)tB}\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{(1-\lambda)\nu(-\alpha)tB};\quad \nu(\alpha)=\frac{\mathrm{e}^{\alpha}-1}{\alpha} \tag{4.9}$$

の公式が成り立つ．そこで，$\lambda=0$ の場合の公式 (4.9) を用いると，式 (4.4) は次のようにあらわに積分形で表される：

$$\begin{aligned}P(x,t)&=\exp\left(-\gamma t\frac{\partial}{\partial x}x\right)\exp\left[\left(1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}\right)\left(\frac{\varepsilon}{2\gamma}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right]P(x,0)\\&=\left\{\frac{2\pi\varepsilon\left(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1\right)}{\gamma}\right\}^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left[-\frac{(y-\mathrm{e}^{-\gamma t}x)^2}{2\varepsilon\left(1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}\right)/\gamma}\right]P(y,0)dy.\end{aligned} \tag{4.10}$$

要するに，拡散とドリフトの効果を分離して扱うことができることになる．その代わり，2 つの絡み合いの効果は，式 (4.10) で示されているように，拡散定数が有効的に時間に依存することに反映されている．すなわち，最初はランダムな力（ノイズ）によって体系のゆらぎが大きくなり（拡散し），それらがさらに方向性のある平均的な力（**ドリフトの効果**）によって発展していき，くり込まれた非線形の（指数関数 $\exp(2\gamma t)$ の）有効的時間によって上記 2 つの効果が統合される．これは，“手順の分離と統合” の興味深い例の一つである．この戦略は，ドリフト項が非線形の場合にも漸近的に有効であり，**秩序形成の “スケーリング理論”** として多くの問題に応用されている[12~14]．

ところで，この例（交換関係が式 (4.8) のように閉じている演算子の集まり）のように，リー代数をみたす演算子に対しては，指数演算子の指数積分解が厳密にできるが，一般の演算子に対しては，次項で示すように近似的な指数積分解を扱うことになる．

4.1.3 指数演算子の高次分解とその実用的意義

前項の例からもわかる通り，互いに非可換な演算子 A と B に対して e^{xA} と

e^{xB} がそれぞれ解析的に扱える場合には，**指数演算子** $e^{x(A+B)}$ を e^{xA} と e^{xB} の巾積

$$
\begin{aligned}
& e^{x(A+B)} = e^{t_1 xA} e^{t_2 xB} e^{t_3 xA} e^{t_4 xB} \cdots e^{t_M xB} + O(x^{m+1}) \\
& \equiv f_m(xA, xB) + O(x^{m+1}) \qquad (4.11)
\end{aligned}
$$

の形に近似的に分解すると，大変便利なことが多い[4~11]．ここで，上式の右辺が x の m 次まで左辺と一致するようにパラメータ $\{t_j\}$ を決める．こうして求めた右辺の指数積を $f_m(xA, xB)$ と書き，m 次指数積と呼ぶ．容易に $m = 1, 2$ に対しては，

$$
f_1(xA, xB) = e^{xA} e^{xB} \left(\text{または}\ e^{xB} e^{xA} \right), \qquad (4.12)
$$

および

$$
f_2(xA, xB) = e^{\frac{x}{2}A} e^{xB} e^{\frac{x}{2}A} \left(\text{または}\ e^{\frac{x}{2}B} e^{xA} e^{\frac{x}{2}B} \right) \equiv S_2(x) \qquad (4.13)
$$

であることがわかる．

しかし，$m \geq 3$ になると，見掛けによらず，大変面倒な問題となる[4~11]．特に，初等的に式 (4.11) の両辺の指数演算子をそれぞれ，A と B の非可換性に配慮しながら m 次まで展開し，各項を整理し，両辺が演算子として m 次まで互いに一致する条件式を求めると，パラメータ $\{t_j\}$ に関する非線形の連立方程式が多数出てくる．パラメータ $\{t_j\}$ の数 M が小さいと連立方程式の数のほうが多くなり，解がない．すでに多くの人がこの問題に苦労した末に $m = 3, 4$ などに対しては特殊な解を見つけている[3]．筆者は，$m = 4$ の場合を詳しく調べているうちに，それまでの他の研究とは全く異なる系統的な分解公式の構成法を発見し，任意の次数まで，パラメータ $\{t_j\}$ を解析的に与える一般論を作ることに初めて成功した[4~6]．それが次に説明する漸化式の方法である．

その漸化式の方法による高次分解の話に入る前に，m 次の分解公式 $f_m(xA, xB)$ がわかると，実際の科学・技術の分野の研究でどのようなご利益があるのかにふれておきたい．変数 x が小さくない場合にはどうするか工夫が必要である．それはトロッター公式

$$
e^{x(A+B)} = \lim_{n \to \infty} \left(e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n = \left(e^{\frac{x}{n}A} e^{\frac{x}{n}B} \right)^n + O\left(\frac{x^2}{n} \right) \qquad (4.14)
$$

にならって調べてみると容易に

$$
e^{x(A+B)} = \left(e^{\frac{x}{n}(A+B)} \right)^n = \left(f_m\left(\frac{xA}{n}, \frac{xB}{n} \right) \right)^n + O\left(\frac{x^{m+1}}{n^m} \right) \quad (4.15)
$$

となることがわかる[3~11]．したがって，変数 x が 1 より大きくても，トロッター数 n を充分大きくすれば，また，分解公式の次数 m を大きくすれば，いくらでも近似の精度を上げることができる．勿論，高次分解公式の次数が高くなる

ほど，計算のアルゴリズムが複雑になるので計算精度との兼ね合いが肝要となる．通常，4 次の分解公式，特に，筆者の発見した安定性のよい標準分解公式 $S_4^*(xA, xB)$ がよく利用されている（多くの数値計算のプログラムに実装されている）．

このように，もとの指数演算子 $\exp[x(A+B)]$ を A だけの指数演算子と B だけの指数演算子をくり返し掛け合わせることによって精度よく近似することは，前に述べた “手順の分離と統合” の典型的な例になっている．ただし，A と B はそれぞれ単独には簡単な解析的処理のできる演算子を表すものとする．最近の科学・技術の研究では，実際に実験する前に計算機実験をすることが多く，そのときに，上に説明した公式が大変役に立つ．単純な計算のくり返しを多数回行うのは超高速計算機の最も得意とするところである．式 (4.11) と式 (4.15) の組合せによるアルゴリズムは，様々な科学・技術のシミュレーションの分野で最近よく用いられている．

そこで，次の節では，安定性の良い分解公式を体系的に構成する一般的な方法を解説する．

4.1.4 漸化式の方法による高次分解[4~11)]

一般に，q 個の任意の演算子 $\{A_j\}$ に対して，式 (4.11) の形の $(m-1)$ 次の指数積 $Q_{m-1}(x)$ が求まったとする：

$$\mathrm{e}^{x(A_1+\cdots+A_q)} = Q_{m-1}(x) + \mathrm{O}(x^m). \tag{4.16}$$

このとき，m 次の近似式は，r を適当にとって

$$Q_m(x) = \prod_{j=1}^{r} Q_{m-1}(p_{m,j}x) \tag{4.17}$$

で与えられる．ただし，パラメータ $\{p_{m,j}\}$ は条件式

$$\sum_{j=1}^{r} p_{m,j}^m = 0,\ \text{および}\ \sum_{j=1}^{r} p_{m,j} = 1 \tag{4.18}$$

で決まる[4,5)]．その理由は，式 (4.17) の右辺の積を式 (4.16) を用いて計算してみると，式 (4.18) の第 2 式の条件より，$(m-1)$ 次まで正しいことは直ちにわかる．次に m 次の補正項が式 (4.18) の第 1 式の左辺に比例することに着目すればよい．

ここで新たな困難が現れる．式 (4.18) は m が奇数のときは，実数解が存在するが，m が偶数のときは解は複素数となる．これでは実用上不便である．幸いにして，次の条件 $p_{m,j} = p_{m,M-j+1}$ をみたす**対称解** $S_m(x)$ を用いると，奇数解 $S_{2m-1}(x)$ は自動的に $2m$ 次まで正しいことがわかる：

$$S_{2m-1}(x) = S_{2m}(x); \quad S_{2m}(x)S_{2m}(-x) = 1. \tag{4.19}$$

この事実を用いると，条件式 (4.18) は

$$\sum_{j=1}^{r} p_{2m-1,j}^{2m-1} = 0, \text{ および } \sum_{j=1}^{r} p_{2m-1,j} = 1 \tag{4.20}$$

に置き換えることができ，常に実数解 $\{p_{2m-1,j}\}$ が存在する．一番簡単には，$r=3$ として，

$$\begin{aligned} S_{2m-1}(x) &= S_{2m}(x) \\ &= S_{2m-3}(k_m x)S_{2m-3}((1-2k_m)x)S_{2m-3}(k_m x) \\ &= S_{2m-2}(k_m x)S_{2m-2}((1-2k_m)x)S_{2m-2}(k_m x) \end{aligned} \tag{4.21}$$

の漸化式で与えられる．ここで，パラメータ k_m は解析解 $k_m = 1/(2-2^{1/(2m-1)})$ で与えられる[4,5]．ところが，別な問題が生じる．それは，$k_m > 1$ となり，$m \to \infty$ で $S_{2m}(x)$ がもとの指数演算子に収束しないことである．これを解決するには，$r=5$ として，次の**標準分解公式**と呼ばれる漸化式[4,5]を用いればよい：

$$\begin{aligned} &S_{2m}^{*}(x) = \left[S_{2m-2}^{*}(p_m x)\right]^2 S_{2m-2}^{*}((1-4p_m)x)\left[S_{2m-2}^{*}(p_m x)\right]^2; \\ &p_m = \frac{1}{4-4^{1/(2m-1)}}. \end{aligned} \tag{4.22}$$

明らかに，$m \geq 2$ のすべての m に対して，$\frac{1}{3} < p_m < \frac{1}{2}$ および $|1-4p_m| < \frac{2}{3}$ となり，$S_{2m}^{*}(x)$ はもとの指数演算子に収束することが証明できる[8]．特に，4 次の標準分解公式 $S_4^{*}(x) = S_2^2(p_2 x)S_2((1-4p_2)x)S_2^2(p_2 x)$ が多くの分野で広く利用されている．ただし，

$$S_2(x) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}\cdots \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}}\mathrm{e}^{xA_q}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{q-1}}\cdots \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}; \quad p_2 = \frac{1}{4-4^{1/3}} \tag{4.23}$$

である．

以上のように，漸化式の方法を用いると，任意の次数まで解析的なパラメータを用いて容易に精度の良い指数積近似公式が作れる．筆者は大学院のときから指数演算子に魅せられ，折にふれてこれを研究してきた．その成果を次節以降にも解説する．

4.2 指数積分解の一般的考察

前節で説明した**指数演算子の積公式**の理論は，それまでの個々の近似公式を求める単発的な研究と異なり，「漸化式の方法」という極めて系統的な処法であり，**高次の指数積公式**を求めるのに大変有効である．ここでは，今までの個々の近似公式も容易に導く一般的な方法論を説明し，その応用例を解説する．

4.2.1 指数演算子はなぜ重要か

多くの理論科学の解きたい問題は，関心のある量 $P(t)$ についての微分方程

式 $dP(t)/dt = \Gamma P(t)$ の形に表される．ここで，Γ は $P(t)$ に作用する演算子（作用素）であり，簡単のために時間 t に依らないものとする．この方程式は形式的に解くことができ，$P(t) = \mathrm{e}^{t\Gamma}P(0)$ と表される．このように，指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ は理論科学の至るところで重要な役割を果している．具体的に $P(t)$ の様子を知るためには，指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ の働きを詳しく調べなければならない．演算子 Γ の固有関数や固有値が解析的にすべて求まる場合には，$P(t)$ が厳密に求まる．しかし，多くの場合，それは困難である．その困難な理由は，Γ そのものを厳密に取り扱おうとするからである．前節で説明した「手順の分離」という考え方にしたがって，演算子 Γ をいくつかの扱い易い（厳密に処理できる）演算子 $\{\Gamma_i\}$ の和に分解する：$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \cdots + \Gamma_r$．ここで，仮定により，個々の指数演算子 $\{\mathrm{e}^{t\Gamma_i}\}$ は解析的に処理できるものとする．すなわち，すべての要素（行列要素など）が容易に与えられるとする．しかし，$\{\Gamma_i\}$ は互いに非可換なために，全体の指数演算子 $\mathrm{e}^{t\Gamma}$ を求めるには，何らかの近似的な取扱いが必要になる．すぐに思いつく方法は，短時間近似法，すなわち，次のようなテイラー展開 $\mathrm{e}^{t\Gamma} = 1 + t\Gamma + t^2\Gamma^2/2 + \cdots + t^n\Gamma^n/n! + \cdots$ を行い，n 次で近似する方法である．しかし，この展開近似には，もとの指数演算子の持つ対称性，例えば，**ユニタリ性**や**シンプレックティックな性質**などを保存しないという致命的な欠陥がある．それに比べて，**指数積分解近似法**（$\{\mathrm{e}^{p_i t\Gamma_i}\}$ の積で近似する方法）は，上記の対称性を保存している．対称性を保存する近似法であるという性質は，現象の本質を理解する上で大変重要である．それゆえに，筆者は若いときから，この指数積公式とその高次分解の研究にこだわってきたのである．

4.2.2　高次分解公式の一般論

(i) 問題の設定

ここでは，前節の記号 $\{\Gamma_i\}$ の代わりに $\{A_i\}$ を用いて，

$$\mathrm{e}^{x(A_1+\cdots+A_r)} = f_m(x) + \mathrm{O}(x^{m+1});$$
$$f_m(x) = \mathrm{e}^{t_1A_1}\cdots\mathrm{e}^{t_rA_r}\mathrm{e}^{t_{r+1}A_1}\mathrm{e}^{t_{r+2}A_2}\cdots\mathrm{e}^{t_MA_r} \tag{4.24}$$

の形の m 次近似式を求める方法を説明する．ただし，$\{t_j\}$ は x に比例する適当なパラメータである．

4.1.3 項でも述べた通り，一番初等的な方法は，式 (4.24) の両辺のそれぞれの指数演算子を，$\{A_j\}$ の非可換性に配慮しながら x の m 次まで展開し，各項を整理し，両辺が演算子として m 次まで一致するように，パラメータ $\{t_j\}$ を決めることである．$r=2$ の場合でも m が 3 以上になると，見掛けによらず大変面倒になる．まして，一般の r に対しては，この初等的方法は絶望的である．

(ii) BCH 公式と交換子の作る自由リー代数の次元公式

ここでは，ベーカー・キャンベル・ハウスドルフ (Baker–Campbell–Hausdorff) の公式（以下，BCH 公式と略す）を利用する方法を説明する．式 (4.24) の右

辺の $f_m(x)$ を一つのまとまった指数演算子の形に変形する：

$$f_m(x) = \exp[\Phi_m(xA_1, xA_2, \cdots, xA_r)]. \tag{4.25}$$

ここで, $\Phi_m(\{xA_j\})$ は, $\{A_j\}$ から作られる**交換子**(交換関係 $[A_i, A_j]$, $\big[[A_i, A_j], A_k\big]$ など) の線形結合で表される (交換子の積 $[A_i, A_j]^2, [A_i, A_j] \times \big[[A_i, A_j], A_k\big]$ などは現れないことが証明できる). そこで, k 次の交換子の全体を $\{Z_{k,j}; j = 1, 2, \cdots, w(k)\}$ と書くことにする. この**自由リー代数**の次元 $w(k)$ は, メービュウス関数 $\mu(d)$ を用いて

$$w(k) = \frac{1}{k}\sum_{d/k} \mu(d) r^{k/d} \tag{4.26}$$

と表される (**ヴィット (Witt) の公式**)[11]. ただし, 記号 d/k は, d が k の約数であることを表す. また, **メービュウス関数** $\mu(d)$ は, 正の整数 d に対して, $1, 0, -1$ だけの値をとり, $\mu(1) = 1$, p が素数なら $\mu(p) = -1$, $k > 1$ に対して $\mu(p^k) = 0$, また, 互いに素な b と c に対して $\mu(bc) = \mu(b)\mu(c)$ によって定義される. 例えば, $\mu(2) = -1$, $\mu(3) = -1$, $\mu(4) = \mu(2^2) = 0$, $\mu(5) = -1$, $\mu(6) = \mu(2)\mu(3) = (-1) \times (-1) = 1$, $\mu(7) = -1$, $\mu(8) = \mu(2^3) = 0, \cdots$. したがって,

$$
\begin{aligned}
&w(1) = \mu(1)r = r = {}_r\mathrm{C}_1, \quad w(2) = \frac{1}{2}(\mu(1)r^2 + \mu(2)r) = \frac{1}{2}r(r-1) = {}_r\mathrm{C}_2,\\
&w(3) = \frac{1}{3}(\mu(1)r^3 + \mu(3)r) = \frac{1}{3}r(r^2-1),\\
&w(4) = \frac{1}{4}(\mu(1)r^4 + \mu(2)r^2 + \mu(4)r) = \frac{1}{4}r^2(r^2-1),\\
&w(5) = \frac{1}{5}(\mu(1)r^5 + \mu(5)r) = \frac{1}{5}r(r^4-1),\\
&w(6) = \frac{1}{6}(\mu(1)r^6 + \mu(2)r^3 + \mu(3)r^2 + \mu(6)r) = \frac{1}{6}r(r^5 - r^2 - r + 1)\\
&\qquad = \frac{1}{6}(r-1)r(r+1)(r^3+r-1), \cdots
\end{aligned} \tag{4.27}
$$

となる. 特に, 2 つの演算子 A と B の作る自由リー代数の次元 $w(k)$ は, 式 (4.27) で $r = 2$ とおいて, $w(1) = 2, w(2) = 1, w(3) = 2, w(4) = 3, w(5) = 6, w(6) = 9, \cdots$ である. 当然のことであるが, 式 (4.27) からも $w(k)$ はすべての $k(\geq 1)$ と $r(\geq 2)$ に対して正の整数であることがわかる.

(iii) BCH 公式の役割と具体例

自由リー代数の次元 $w(k)$ について詳しく説明したのは, 後で具体的に指数積公式を求める際に重要になるからである. 実際, 式 (4.25) の Φ_m を $m = 1, r = 2$ の場合に書き下すと, $\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B$ に対する次のような BCH 公式が得られる[11]：

$$
\begin{aligned}
\log(\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B) \equiv \Phi_1(A, B) &= A + B + \frac{1}{2}[A, B] - \frac{1}{12}\big[[A, B], A\big] + \frac{1}{12}\big[[A, B], B\big]\\
&\quad - \frac{1}{24}\Big[\big[[A, B], B\big], A\Big] - \frac{1}{720}\Big[\Big[\big[[A, B], B\big], B\Big], B\Big]
\end{aligned}
$$

$$+\frac{1}{720}\Big[\big[[[A,B],A],A\big],A\Big]+\frac{1}{180}\Big[\big[[[A,B],A],A\big],B\Big]$$
$$-\frac{1}{180}\Big[\big[[[A,B],A],B\big],B\Big]+\frac{1}{120}\Big[[A,B],[[A,B],A]\Big]$$
$$+\frac{1}{360}\Big[[A,B],[[A,B],B]\Big]+\cdots. \tag{4.28}$$

この例からも，それぞれの次数の交換子の数は対応する $\{w(k)\}$ の値を越えないことがわかる．両者はほとんど一致している．4 次の項は，たまたま 1 個しか現れないが，他にも独立な交換子としては，$\big[[[A,B],A],A\big]$ と $\big[[[A,B],B],B\big]$ がある．$r=3$ 以上の場合にも同様に Φ_m を求めることができるが，独立でない交換子が増えてくるので，表現形式が一意的でなくなり，上に求めた独立な数（次元数）$w(k)$ の表式はますます重要になってくる．例えば，3 個の演算子 A,B,C の 3 次の交換子のうち，A,B,C を 1 回ずつ含むものは $\big[[A,B],C\big]$, $\big[[B,C],A\big]$, $\big[[C,A],B\big]$ などがあるが，これら 3 個の和は 0 となり（ヤコビの恒等式），独立なものは 2 個である．この他にも，3 次の交換子としては，$\big[[A,B],A\big]$, $\big[[A,B],B\big]$, $\big[[B,C],B\big]$, $\big[[B,C],C\big]$, $\big[[C,A],C\big]$, $\big[[C,A],A\big]$ の 6 個の独立なものがあり，合計 8 個となる．$r=3$ に対する $w(3)$ は，式 (4.27) より，$w(3)=8$ となり，整合している．

(iv) 高次分解公式を与えるパラメータの決め方

さて，これだけの準備のもとに，式 (4.25) の Φ_m を，自由リー代数の基底 $\{Z_{k,j}\}$ を用いて

$$\Phi_m=\sum_{k=1}^{\infty}\sum_{j=1}^{w(k)}a_{k,j}(\{t_i\})Z_{k,j}\equiv\sum_{j=1}^{r}a_{1,j}A_j+\sum_{k=2}^{\infty}x^kR_k \tag{4.29}$$

のように展開する．ただし，$w(1)=r$ および $Z_{1,j}=A_j$, $Z_{2,1}=[A_2,A_1]$, $Z_{2,2}=[A_3,A_1]$, $Z_{2,3}=[A_3,A_2],\cdots$ である．容易に，

$$a_{1,j}=\sum_{k=0}t_{j+kr} \tag{4.30}$$

であることがわかる．したがって，式 (4.25) がもとの指数演算子 $\exp[x(A_1+\cdots+A_r)]$ の m 次近似式になるための条件は，式 (4.29) の第 1 項が $x(A_1+\cdots+A_r)$ と一致し，第 2 項は $R_2=R_3=\cdots=R_m=0$ の条件をみたさなければならないので，

$$a_{1,j}=x\quad(j=1,\cdots,r),\quad a_{k,j}=0\quad(k=2,\cdots,m;j=1,\cdots,w(k)) \tag{4.31}$$

で与えられる．ここで，$a_{k,j}$ は $\{t_i\}$ の関数であるから，式 (4.31) はパラメータ $\{t_i\}$ を決める条件式となる．これが m 次の指数積を求める一般的な方法である．具体的に係数式 $\{a_{k,j}\}$ を求めるには，次の章で解説する「量子解析」を

用いるのが便利である[11]．

(v) m 次近似の基底の次元数

高次分解公式 (4.25) を与える指数の肩の m 次近似の演算子 Φ_m を構成する交換子の張る最小の線形空間の次元数 D_m は，自由リー代数の次元数 $\{w(k)\}$ を用いて，

$$D_m = w(1) + w(2) + \cdots + w(m) \tag{4.32}$$

と表される．特に，$r = 2$ すなわち，2 つの演算子 A と B に対しては，式 (4.27) と (4.32) より，$D_1 = w(1) = 2$, $D_2 = w(1) + w(2) = 3$, $D_3 = w(1) + w(2) + w(3) = 5$, $D_4 = 8$, $D_5 = 14$, $D_6 = 23, \cdots$ となる．

(vi) 一般的定式化とテイラー展開による方法との比較

一般的定式化の決定的な重要性を理解するために，最初に述べた「一番初等的な方法」，すなわち，式 (4.24) の両辺を，非可換性を考慮に入れて，すべてテイラー展開し，両辺に現れるそれぞれの対応する項が互いに一致する条件からパラメータ $\{t_j\}$ を決める方法と比較してみよう．

簡単のために，$r = 2$ の場合，すなわち，$\mathrm{e}^{x(A+B)}$ の指数積分解公式を求める「初等的な方法」を考える．m 次の項には，$(A+B)^m$ の展開式の演算子の数 2^m の種類の演算子 $(A^m, A^{m-1}B, BA^{m-1}, A^{m-2}BA, \cdots, B^m)$ が現れる．したがって，展開で現れる m 次までの演算子の種類 $(A, B, A^2, AB, BA, B^2, \cdots, B^m)$ の数 N_m は $N_m = 2 + 2^2 + \cdots + 2^m = 2^{m+1} - 2$ となる．ちなみに，$N_1 = 2$, $N_2 = 6$, $N_3 = 14$, $N_4 = 30$, $N_5 = 62$, $N_6 = 126, \cdots$ である．

この「一番初等的な方法」でパラメータ $\{t_j\}$ を決める方程式の数は，一見したところ N_m という大きな数になる．実際，この数 N_m は，Φ_m を張る最小の線形空間の次元数 D_m と比較すると，$m \gg 1$ のとき，$D_m \ll N_m$ となる．この事実は何を意味するのであろうか．

結論を先に言えば，「初等的な方法」で求める $\{t_j\}$ の決定方程式は互いに独立でないものが多く含まれ，無駄が多いということである．すなわち，式 (4.24) のパラメータ $\{t_j\}$ の数 M は，N_m より，はるかに小さな値で済むのである．この数学的事実に気づいていれば，多くの研究論文は不要だったことになる．しかし，研究の歴史を見ればわかるように，皆このような無駄の上に革進的な発見があるのが常である．

上の状況を具体的に説明する．実用的な 3 次近似や 4 次近似の公式の構成について，いきなり上の 2 つの方法を試みるのは，大きな感動を味わうことはできるが，かなり繁雑になるので，（大変まわりくどいけれども）すでによく知られている 1 次近似や 2 次近似の公式から順に説明する．

(vi-a) 1 次近似の場合

式 (4.24) の両辺を x の 1 次まで展開し，x の 1 次の項を両辺書き下すと $xA + xB = (t_1 + t_3 + \cdots + t_{M-1})A + (t_2 + t_4 + \cdots + t_M)B$ となる．よって，

次の 2 つの方程式が得られる：

$$t_1 + t_3 + \cdots + t_{M-1} = x, \quad t_2 + t_4 + \cdots + t_M = x. \tag{4.33}$$

したがって，$M \geq 3$ 以上では不定方程式になり，$M = 2$ に対して，$t_1 = t_2 = x$ が解となり，よく知られた 1 次近似公式

$$f_1(x) = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB} \ (\text{または } \mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{xA}) \tag{4.34}$$

が得られる．一般論の立場から見ると，$D_1 = N_1 = 2$ であるから，もともと $M = 2$ として議論を始めてよかったのである（これは自明のことである！）．交換子は現れず，A と B を基底にした 2 次元の線形空間で話は済む．

(vi-b) 2 次近似の場合

次に，式 (4.24) の両辺を 2 次近似まで展開すると，x の 2 次の項として

$$\begin{aligned}
&\frac{x^2}{2}(A^2 + AB + BA + B^2) \\
&= \frac{1}{2}(t_1^2 + t_3^2 + 2t_1t_3 + \cdots)A^2 + \frac{1}{2}(t_2^2 + t_4^2 + 2t_2t_4 + \cdots)B^2 \\
&\quad + \{t_1(t_2 + t_4 + \cdots) + t_3(t_4 + t_6 + \cdots) + \cdots\}AB \\
&\quad + \{t_2(t_3 + t_5 + \cdots) + t_4(t_5 + \cdots) + \cdots\}BA
\end{aligned} \tag{4.35}$$

のような演算子等式が得られる．それぞれの項を等置して，式 (4.33) の他に，次の 4 つの方程式

$$\begin{aligned}
&t_1^2 + t_3^2 + 2t_1t_3 + \cdots = x^2, \quad t_2^2 + t_4^2 + 2t_2t_4 + \cdots = x^2, \\
&t_1(t_2 + t_4 + \cdots) + t_3(t_4 + t_6 + \cdots) + \cdots = \frac{x^2}{2}, \\
&t_2(t_3 + t_5 + \cdots) + t_4(t_5 + \cdots) + \cdots = \frac{x^2}{2}
\end{aligned} \tag{4.36}$$

が得られる．こうして，$N_2 = 6$ に対応して 6 つの方程式が得られる．したがって，パラメータ $\{t_j\}$ の数 M は $M = 6$ とすればよいことになる．このような答のわかっている問題でバカ正直に 6 元 2 次方程式を解こうとする人は皆無であろう．それでも解けと言われれば，$t_j = s_j x$ とおいてコンピュータで数値的に $\{s_j\}$ を求めるかもしれない．結果は，無数に解が現れ，不定となる．すでに賢明な読者は，6 つの方程式は独立ではなく，3 つまで減らせることにお気づきであろう．前もって，メービュウス関数 $\mu(k)$ を使った一般論を説明したのは，このための伏線であった．その一般論によると，2 次までの自由リー代数の次元 D_2 は，2 つの演算子 A, B（すなわち $r = 2$ の場合）に対しては，式 (4.32) より $D_2 = 3$ であるから，上の状況は，容易に納得できるであろう．逆に一般論の数理的構造が，BCH 公式を通して，交換子のみの基底で表されることであるという本質が理解できる．すなわち，2 次近似の場合には，$A, B, [A, B]$ の 3 個の係数を決める問題に帰着される．

したがって，2 次近似の場合には，t_1, t_2, t_3 までの 3 つの指数積で分解でき，$t_1 = t_3 = \frac{x}{2}$, $t_2 = x$ となり，2 次分解公式は，次のよく知られた対称式

$$S_2(x) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A} \quad (\text{または } \mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}B}) \tag{4.37}$$

で与えられる．

ちなみに，方程式 (4.33) と (4.36) のうち，独立なものは，(4.33) の 2 つと式 (4.36) の第 3 また第 4 方程式のどちらか一つの合計 3 つである．これが一般論の $D_2 = 3$ の意味である．

(vi-c) 3 次以上の指数積公式の場合—「漸化式の方法」発見の糸口を与える

筆者は，1990 年前後から，他の分野での 3 次分解に関する多くの個々の研究を知らずに，幸いにも，一般の高次分解公式の研究に無鉄砲にも没頭した．最初は，「一番初等的なテイラー展開の方法」で，しかも，いきなり 3 次分解公式を求めようとして，展開パラメータ $\{t_j\}$ の数を少しずつ増やしながら，それらの連立方程式を解くことに労力を費やし，次のようなことに気づいた．

筆者の戦略は，できる限り簡単な表式で高次分解公式を作ることであったので，2 次近似公式でも現れた対称分解公式に目をつけた．2 次近似公式の求め方からわかる通り，まず 1 次近似の条件を求め，その後で対称化の条件 $t_1 = t_3$ をつけ加えることにより，2 次近似が求まる．実は，この性質は，前節でも説明した通り，一般の高次分解に関しても成り立つ定理である：

定理 4.1　奇数次の近似式，すなわち $(2m-1)$ 次の近似式 $S_{2m-1}(x)$ は次の意味で対称的，すなわち，

$$S_{2m-1}(x)S_{2m-1}(-x) = 1, \text{ すなわち } S_{2m-1}^{-1}(x) = S_{2m-1}(-x) \tag{4.38}$$

であれば，実は $S_{2m-1}(x)$ は $2m$ 次まで正しい．したがって，式 (4.24) の積の形で $2m$ 次近似対称公式を構成するための最小の数 $M_{\min}(2m)$ は

$$M_{\min}(2m) = w(1) + w(3) + w(5) + \cdots + w(2m-1) \tag{4.39}$$

で与えられる．

そこで，初等的方法で 3 次（したがって 4 次）近似公式を作る場合に，最初から対称式を対象にして考える．いろいろと試行錯誤の末（一般的な定式化に気づく前），対称な 3 次近似式を作るには，パラメータ $\{t_j\}$ は最小でも t_1, t_2, t_3, t_4 まで必要であることがわかった．すなわち，

$$S_3(x) = \mathrm{e}^{t_1A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_3A}\mathrm{e}^{t_4B}\mathrm{e}^{t_3A}\mathrm{e}^{t_2B}\mathrm{e}^{t_1A} \tag{4.40}$$

とおき，すべての指数演算子を 3 次まで展開し $\{t_j\}$ の決定方程式を具体的に労をいとわず書き下すと 14 個現れる．未知数の個数は 4 であり，方程式の個数のほうが大きいので，一見，解が存在しないように思われるが，適当に勘を働

かせて 4 個の方程式を選び出し解いてみると，

$$t_1 = \frac{1}{2}px, \quad t_2 = px, \quad t_3 = \frac{1-p}{2}x, \quad t_4 = (1-2p)x;\ p = \frac{1}{2-2^{1/3}} \tag{4.41}$$

という解析的な解が見つかった．残りの 10 個の方程式にこの解を代入してみると，何と驚いたことにすべて解になっているではないか．そのときは，狐につままれたような気がしたものである．何と幸運な問題に出会ったことかと喜んだ．しかし，こんなことが起こるのは，この問題の背後に何か隠れた対称性があるに違いないと考え，解のパラメータ (4.41) を眺めながら，式 (4.40) の $S_3(x)$ をまとめ直してみた．すると，実に美しい次のような対称性をもつ形式を発見した：

$$\begin{aligned} S_3(x) = S_4(x) &= (\mathrm{e}^{t_1 A}\mathrm{e}^{t_2 B}\mathrm{e}^{t_1 A})(\mathrm{e}^{(t_3-t_1)A}\mathrm{e}^{t_4 B}\mathrm{e}^{(t_3-t_1)A})(\mathrm{e}^{t_1 A}\mathrm{e}^{t_2 B}\mathrm{e}^{t_1 A}) \\ &= (\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA}\mathrm{e}^{pxB}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA})(\mathrm{e}^{\frac{1-2p}{2}xA}\mathrm{e}^{(1-2p)xB}\mathrm{e}^{\frac{1-2p}{2}xA})(\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA}\mathrm{e}^{pxB}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}pxA}) \\ &= S_2(px)S_2((1-2p)x)S_2(px). \end{aligned} \tag{4.42}$$

このときの興奮は今でも忘れられない．なぜなら，この発見は単に 3 次近似，4 次近似を求めることだけでなく，任意の次数の公式を求める方法，すなわち，**“漸化式” の方法**の発見になっていたからである．すなわち，$S_{2m-2}(x)$ をもとにして $S_{2m}(x)$ が次のように簡単に構成できる：

$$S_{2m}(x) = S_{2m-1}(x) = S_{2m-2}(p_m x)S_{2m-2}((1-2p_m)x)S_{2m-2}(p_m x). \tag{4.43}$$

ただし，パラメータ p_m は式 (4.43) の指数積の x^{2m-1} の項が消える条件

$$2p_m^{2m-1} + (1-2p_m)^{2m-1} = 0;\ p_m = \frac{1}{2-2^{1/(2m-1)}} \tag{4.44}$$

で与えられる．もう一つの条件は x の 1 次がもとの指数演算子を与えるようにすることであり，式 (4.43) の $S_2(x)$ の変数を x の代わりに $p_m x$ とすると，残りの変数は自動的に $(1-2p_m)x, p_m x$ と決まってしまうのである．ここでも対称性は重要な働きをしている．要するに，パラメータに関する実質的な条件は，筆者の発見した対称解を求める方法では，たった一つの式 (4.44) になってしまうのである．これが，前節で説明した “漸化式の方法” による高次分解の理論である．「漸化式」と言っても，数列の理論などで使われるものは式の係数まで固定されている．ここでの「漸化式」は形が漸化的であるが，そこに使われるパラメータは毎回変化していることに注意されたい．また，この漸化式の方法では，演算子 $\{A_j\}$ の数 r に関係なく高次分解公式が作れる．すなわち，

$$S_2(x) = \mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{r-1}}\mathrm{e}^{xA_r}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_{r-1}}\cdots\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_2}\mathrm{e}^{\frac{x}{2}A_1} \tag{4.45}$$

から漸次，高次分解を作っていけばよい．この方法は，様々の他の漸化式へと無限に拡張できる「概念的な方法論」の提唱になっている．

このようにして，「初等的な解法」と「一般的定式化」とを比較すると，その本質的な違いとメリット・デメリットがわかる．後者では，M 個の個別の指数演算子 $\{e^{t_j A}\}, \{e^{t_k B}\}$ の積を一つの指数演算子にまとめて BCH 公式の形に変形するところが，一般論のキーポイントになる．この変形を効率的に行うには，次章で詳しく解説する筆者の提唱した「量子解析」の方法を用いるとよい．

以上説明した通り，"初等的方法による高次分解" の研究は，一般的定式化に気づく前に行ったために却って "漸化式の方法" の発見という思いがけない幸運に恵まれた．このアイデアはどの分野の研究者も筆者の発見以前には気づかなかったものである[11, 15]．

次節では，さらに様々な高次分解公式の作り方について解説し，その具体的な応用にふれる．

4.3 指数演算子の一般分解理論

本節では，指数積公式の数理的側面と様々な拡張形式について解説する．特に，順序付け操作 P と対称化操作 S を用いた，**指数演算子の一般分解理論**を詳しく説明する．

前節で説明した通り，指数演算子の高次分解公式を求める一般的な方法の一つは，BCH 公式[16]を利用して目指す指数積演算子を逆に一つの指数演算子にまとめて与えられた演算子と望む次数まで一致する条件を求めることである[15, 17, 18]．そこで，まず，BCH 公式の本質である数理構造をもう一度詳しく議論しておく．

4.3.1 BCH 公式の本質

非可換な演算子 $A_1, A_2, \cdots, A_r$ に対して

$$e^{A_1} e^{A_2} \cdots e^{A_r} = e^{\Phi(A_1, A_2, \cdots, A_r)} \tag{4.46}$$

で定義される $\Phi(\{A_j\})$ は $\{A_j\}$ の和と $\{A_j\}$ から作られる交換子の線形結合で表されることが BCH の本質である．このことは，次のフリードリックス (**Friedrichs**) の定理を用いて容易に示される．

定理 4.2 $\{A_j\}$ とは可換な演算子 $\{A'_j\}$ を考え，式 (4.46) の $\{A_j\}$ の代わりに $\{A'_j\}$ を用いて $\Phi(\{A'_j\})$ を定義する．このとき，$\Phi(\{A_j\})$ が $\{A_j\}$ の和と交換子の線形結合で表されるための必要条件は

$$\Phi(\{A_j + A'_j\}) = \Phi(\{A_j\}) + \Phi(\{A'_j\}) \tag{4.47}$$

となることである．

これは交換子の性質から容易に示せる定理である．さらに，式 (4.46) と $\{A'_j\}$ に対する同形の式を用いて

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\Phi(\{A_j+A'_j\})} &= \mathrm{e}^{A_1+A'_1}\mathrm{e}^{A_2+A'_2}\cdots\mathrm{e}^{A_r+A'_r} = (\mathrm{e}^{A_1}\mathrm{e}^{A'_1})(\mathrm{e}^{A_2}\mathrm{e}^{A'_2})\cdots(\mathrm{e}^{A_r}\mathrm{e}^{A'_r})\\ &= \mathrm{e}^{\Phi(\{A_j\})}\mathrm{e}^{\Phi(\{A'_j\})} = \mathrm{e}^{\Phi(\{A_j\})+\Phi(\{A'_j\})} \qquad (4.48)\end{aligned}$$

となり，式 (4.47) が導かれる．こうして，Φ の線形性が示される．

このの Φ の線形性は，量子解析[11,19]を用いて Φ を具体的に変換子で表す一般的な表式を求めることによっても示すことができる．これは，後で量子解析を詳しく説明するときに，再びふれることにする．

4.3.2 ザッセンハウス（H.J. Zassenhaus）公式による指数積公式[16]

次の分解公式は古くから知られている：

$$\mathrm{e}^{x(A+B)} = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{x^2C_2}\mathrm{e}^{x^3C_3}\cdots. \qquad (4.49)$$

ただし，$C_2, C_3, \cdots$ は次のように与えられる：

$$C_2 = \frac{1}{2}[B, A], \quad C_3 = \frac{1}{3}[C_2, A+2B], \cdots. \qquad (4.50)$$

一般に，漸化的に

$$C_n = \frac{1}{n!}\left[\frac{\partial^n}{\partial x^n}\left(\mathrm{e}^{-x^{n-1}C_{n-1}}\cdots\mathrm{e}^{-x^2C_2}\mathrm{e}^{-xB}\mathrm{e}^{-xA}\mathrm{e}^{x(A+B)}\right)\right]_{x=0} \qquad (4.51)$$

と与えられる[16]．具体的に $\{C_n\}$ を求めるには，BCH 公式 (4.28) をくり返し用いるほうが便利である．例えば，C_2 と C_3 は，BCH 公式 (4.28) より求まる式

$$\begin{aligned}&\mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{xB}\mathrm{e}^{x^2C_2}\mathrm{e}^{x^3C_3}\\ &= \exp\left\{x(A+B) + \frac{x^2}{2}[A, B] + x^2C_2 + \frac{x^3}{12}[[B, A], A-B]\right.\\ &\qquad\left. + \frac{x^3}{2}[A+B, C_2] + x^3C_3 + \mathrm{O}(x^4)\right\} \qquad (4.52)\end{aligned}$$

と，もとの $\mathrm{e}^{x(A+B)}$ とを比較して，容易に求まる．すなわち，

$$\frac{1}{2}[A, B] + C_2 = 0, \quad \frac{1}{2}[A+B, C_2] + \frac{1}{12}[[B, A], A-B] + C_3 = 0 \qquad (4.53)$$

より，式 (4.50) が容易に導ける．

また，$\{C_n\}$ はすべて変換子の線形結合で表されることもわかる．この公式は，高次になるにつれてますます多くの変換子で表されるので，具体的な計算，特に数値計算にはあまり適していない．

4.3.3 対称化操作と順序付け操作による指数積公式の一般論[6,17,20]

(i) 対称化操作 S

前節で説明した高次分解公式の一般論は BCH 公式を利用するものであり，そ

の交換子による線形結合表示を求めることが主となる．この手続きは，美しい枠組みではあるが，非可換な演算子 $A_1, A_2, \cdots, A_r$ の数 r が増え，近似の次数が高くなるほど大変面倒になる．そこで本節では，物理的な視点で，よりわかり易い一般論を解説する[6,17,20]．

指数演算子には，通常の c-数 x で定義される指数関数（古典指数関数）の特徴

$$\mathrm{e}^{x} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} x^n \tag{4.54}$$

と，演算子の非可換性という量子的特徴の両面がある．式 (4.53) より，x, y が c-数のときは，$\mathrm{e}^{x+y} = \mathrm{e}^x \mathrm{e}^y$ という，良く知られた積公式が導かれる．しかし，一般の演算子 A, B に対しては，この積公式は成り立たない．そこで，久保[21]にしたがって，次の対称化操作 S を導入する：

$$\mathrm{S}(A^p B^q) = \frac{p!q!}{(p+q)!} \sum_{\mathrm{Permu}}^{\mathrm{all}} \mathrm{Permu}(A^p B^q). \tag{4.55}$$

ただし，Permu は A と B の順序を可能な限り入れ替える操作（置換）を表す．例えば，

$$\sum_{\mathrm{Permu}} \mathrm{Permu}(AB) = AB + BA, \quad \sum_{\mathrm{Permu}} \mathrm{Permu}(A^2 B) = A^2 B + ABA + BA^2 \tag{4.56}$$

である．式 (4.55) の右辺の係数 $p!q!/(p+q)!$ はその置換の数の逆数である．したがって，A と B が可換なときは，$\mathrm{S}(A^p B^q) = A^p B^q$ である．この記号を用いると，

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{S}(\mathrm{e}^A \mathrm{e}^B) \tag{4.57}$$

という関係式が得られる．こうして，指数関数の特徴的な公式 $\mathrm{e}^{x+y} = \mathrm{e}^x \mathrm{e}^y$ をぎりぎりまで生かしながら変形し，最後に，非可換性（量子効果）を考慮する．これは正に「**手順の分離**」である[6,11,20]．一般に r 個の演算子 $\{A_j\}$ に対しても全く同様に

$$\mathrm{e}^{A_1 + A_2 + \cdots + A_r} = \mathrm{S}(\mathrm{e}^{A_1} \mathrm{e}^{A_2} \cdots \mathrm{e}^{A_r}) \tag{4.58}$$

が成り立つ．

(ii) 順序付け操作による指数積演算子のくり込まれた展開公式

与えられた指数演算子

$$\mathrm{e}^{x\mathscr{H}} \equiv \mathrm{e}^{x(A_1 + A_2 + \cdots + A_r)} \tag{4.59}$$

を個々の指数演算子 $\{\mathrm{e}^{xA_j}\}$ またはそれらの積で作られる低次の近似式 $G_1(x)$, $G_2(x), \cdots, G_s(x)$ の積で近似する問題を再び一般的な視点で考察する．その

ために，パラメータ x を s 個の部分区間 $\{x_j\}$ に分ける：

$$x = x_1 + x_2 + \cdots + x_s. \tag{4.60}$$

ただし，$\{x_j\}$ は負の値をとることも許すことにする．さて，演算子の積

$$F_m(x) = G_1(x_1)G_2(x_2)\cdots G_s(x_s) \tag{4.61}$$

がもとの指数演算子 (4.59) の m 次近似式になるように分割パラメータ $\{p_j \equiv x_j/x\}$ を決定したい．そのためには，演算子 $F_m(x)$ を，もとの演算子 $\mathrm{e}^{x\mathscr{H}}$ （x の無限次まで含むくり込まれた指数演算子！）を出発点にして，x で展開すればよい．そこで，演算子 $G_j(x)$ は s_j 近似式であるとし，次の形で表されるものとする：

$$G_j(x) = \exp\left(x\mathscr{H} + x^{s_j+1}R_{js_j+1} + x^{s_j+2}R_{js_j+2} + \cdots\right). \tag{4.62}$$

ここで，$R_{j,k}$ は $\{A_j\}$ で構成される k 次の演算子である．表記を簡単化するために，不必要な低次の補正（本当は零の部分）まで形の上では入れて

$$G_j(x_j) = \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) \ ; \ R_{j1} = \mathscr{H} \tag{4.63}$$

と書くことにする．ただし，R_{j1} は j によらず $R_{j1} = \mathscr{H}$ である．この表記を用いると，式 (4.61) は

$$\begin{aligned} F_m(x) &= \prod_{j=1}^{s} \exp\left(\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) = \mathrm{P}\exp\left(\sum_{j=1}^{s}\sum_{k=1}^{\infty} x_j^k R_{jk}\right) \\ &= \mathrm{P}\exp\left(xY_1 + x^2Y_2 + \cdots + x^nY_n + \cdots\right) \end{aligned} \tag{4.64}$$

と表せる．ただし，$\{Y_k\}$ は次式で定義される演算子である：

$$Y_k = \sum_{j=1}^{s} p_j^k R_{jk} \ ; \ p_j = \frac{x_j}{x}. \tag{4.65}$$

また，P は次のように定義される "順序付け操作" を表す：

$$\mathrm{P}(R_{jk}R_{lm}) = \begin{cases} R_{jk}R_{lm}\cdots & (j < l), \\ R_{lm}R_{jk}\cdots & (l < j). \end{cases} \tag{4.66}$$

さらに，式 (4.55) で定義される対称化操作 S を，同じ添字 j の R_{jk}, R_{lm}, $\cdots$ に対して用いると，式 (4.63) は

$$F_m(x) = \sum_{n_1,n_2,n_3,\cdots} \frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1!n_2!n_3!\cdots}\mathrm{SP}(Y_1^{n_1}Y_2^{n_2}Y_3^{n_3}\cdots) \tag{4.67}$$

と表せる．ここで，Y_1 は特別な役割を果しており，式 (4.65) より，R_{j1} は j によらず $\mathscr{H}$ に等しいから，

$$Y_1 = \sum_{j=1}^{s} p_j R_{j1} = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j\right) \mathscr{H} = \mathscr{H} \tag{4.68}$$

となり，Y_1 はもとの演算子 $\mathscr{H}$ に等しいことがわかる．そこで，式 (4.67) の $F_m(x)$ に対する一般表式の中から，$n_2 = n_3 = \cdots = 0$ の部分のみをとり出して，n_1 について和をとることにより，目指していた展開公式

$$F_m(x) = \mathrm{e}^{x\mathscr{H}} + \sum_{n_1, n_2, n_3, \cdots}{}' \frac{x^{n_1+2n_2+3n_3+\cdots}}{n_1! n_2! n_3! \cdots} \mathrm{SP}(Y_1^{n_1} Y_2^{n_2} Y_3^{n_3} \cdots) \tag{4.69}$$

が得られる．ただし，記号 $\sum'$ は $n_2 = n_3 = \cdots = 0$ の場合を除く和を表す．

式 (4.69) は，次の高次分解の出発点になる有用な一般展開公式である．「手順の分離」の処方である操作 P と S の導入の有効性[6, 17, 20]に注目してほしい．

(iii) 指数演算子高次分解の一般的処方

指数演算子の一般展開公式 (4.69) を用いると，$F_m(x)$ が与えられたもとの指数演算子 $\mathrm{e}^{x\mathscr{H}}$ の m 次近似式になるための必要十分条件は，式 (4.69) の右辺の第 2 項が x^m の項まで演算子として零になることである．したがって，少なくとも，十分条件は，

"$n_2 = n_3 = \cdots = 0$ を除き，$n_1 + 2n_2 + 3n_3 + \cdots + mn_m \le m$ をみたすすべての正の整数 $n_1, n_2, n_3, \cdots$ に対して

$$\mathrm{SP}(Y_1^{n_1} Y_2^{n_2} Y_3^{n_3} \cdots) = 0 \tag{4.70}$$

となること"

である．

次数 m が大きくなると，式 (4.70) は互いに独立でなくなる場合が起こり得るので注意が必要である[9]．式 (4.70) で操作 SP を行うまでは，Y_1 の中の $p_j\mathscr{H}$ の p_j と $\mathscr{H}$ を切り離してはならない．同様に Y_n の中の p_j^n と R_{jn} も切り離さず 1 つのものとして扱わなければならない．後で示すように，R_{jn} が j に依らないときは，この注意は肝要である．例えば，

$$\mathrm{P}\{(p_j\mathscr{H})(p_k^n R_n)\} = \begin{cases} (p_j\mathscr{H})(p_k^n R_n) = (p_j p_k^n)\mathscr{H} R_n & (j < k), \\ (p_k^n R_n)(p_j\mathscr{H}) = (p_j p_k^n) R_n \mathscr{H} & (k < j) \end{cases} \tag{4.71}$$

となる．同じ添字 j に対しては，

$$\mathrm{S}\{(p_j\mathscr{H})(p_j^n R_n)\} = p_j^{n+1} \cdot \frac{1}{2}(\mathscr{H} R_n + R_n \mathscr{H}) \tag{4.72}$$

のように対称化操作 S が行われる．

(iv) 一つだけの近似式（$G_1(x) = G_2(x) = \cdots = G_s(x) \equiv G(x)$）による展開

式 (4.61) の右辺の $G_j(x)$ がすべて同じ近似式の場合には，式 (4.63) の R_{jk} が添字 j に依らなくなる．例えば，$G(x)$ として 1 次近似式

$$G(x) = F_1(x) = \mathrm{e}^{xA_1} \mathrm{e}^{xA_2} \cdots \mathrm{e}^{xA_r} \tag{4.73}$$

を用いて，上の一般的処方で $m(\geq 2)$ 次近似公式を作る場合を考えてみる．その条件の中には，式 (4.70) からわかるように，

$$\mathrm{SP}(Y_n) = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j^n\right) R_n = 0 \quad (n = 2, 3, \cdots, m) \tag{4.74}$$

の条件式もある．これは次の連立方程式を与える：

$$\sum_{j=1}^{s} p_j^n = 0 \quad (n = 2, 3, \cdots, m). \tag{4.75}$$

偶数の n が含まれているので，この解 $\{p_j\}$ は必ず複素数となってしまう．実用上は，展開パラメータ $\{p_j\}$ は実数であるのが望ましい．唯一実数になるのは，$G(x)$ が $2m$ 次近似式で，$(2m+1)$ 次近似式 $F_{2m+1}(x)$ を作る場合である．この場合には，条件式 (4.70) は一つだけになり，それは，

$$\mathrm{SP}(Y_{2m+1}) = \left(\sum_{j=1}^{s} p_j^{2m+1}\right) R_{2m+1} = 0, \tag{4.76}$$

すなわち

$$\sum_{j=1}^{s} p_j^{2m+1} = 0 \tag{4.77}$$

となるから，実数解が存在することになる．本章の第 1 節で説明した漸化式の方法による解はこの例になっている．

(v) 2 つだけの近似式による実分解公式

まず，1 次漸化式 (4.73) に対して，次のように定義される**チルダ（tilde）演算子** $\tilde{G}(x) = \tilde{F}_1(x)$ を考える[15, 17, 18]：

$$\begin{aligned}\tilde{G}(x) &= \tilde{F}_1(x) = (F_1(-x))^{-1} = (G(-x))^{-1} \\ &= \mathrm{e}^{xA_r}\mathrm{e}^{xA_{r-1}} \cdots \mathrm{e}^{xA_2}\mathrm{e}^{xA_1}.\end{aligned} \tag{4.78}$$

明らかに，このチルダ演算子 $\tilde{G}(x)$ は，式 (4.62) の形で表すと，

$$G(x) = \exp(x\mathscr{H} + x^2 R_2 + x^3 R_3 + \cdots) \tag{4.79}$$

に対して

$$\tilde{G}(x) = \exp(x\mathscr{H} - x^2 R_2 + x^3 R_3 + \cdots + (-1)^{n-1} x^n R_n + \cdots) \tag{4.80}$$

となる．

さて，m 次近似式 $F_m(x)$ をこれら 2 つの 1 次式を交互に積を作った次式で構成する方法を考える：

$$F_m(x) = G(p_1 x)\tilde{G}(p_2 x)G(p_3 x)\tilde{G}(p_4 x) \cdots G(p_{s-1} x)\tilde{G}(p_s x). \tag{4.81}$$

ただし，s は偶数である．この分解の利点は，式 (4.65) で定義される $\{Y_n\}$ が n が偶数のとき，負符号を含むようになることである．すなわち，

$$Y_{2n} = \sum_{j=1}^{s}(-1)^{j-1}p_j^{2n}R_{2n}, \quad \text{および} \quad Y_{2n-1} = \sum_{j=1}^{s}p_j^{2n-1}R_{2n-1}. \quad (4.82)$$

式 (4.74) に対応する条件は

$$\mathrm{SP}(Y_{2n}) = \left(\sum_{j=1}^{s}(-1)^{j-1}p_j^{2n}\right)R_{2n} = 0 \quad (4.83)$$

という条件式に変わり，これは

$$\sum_{j=1}^{s/2}p_{2j-1}^{2n} - \sum_{j=1}^{s/2}p_{2j}^{2n} = 0 \quad (4.84)$$

となるから，実数解を持つようにパラメータ $\{p_j\}$ を決められることになる[15, 17, 18]．

こうして，**非対称な実分解**の一般的なスキームが見つかった[15, 17, 18]．

(v-a) 2 次の分解公式

2 次近似のパラメータ $\{p_j\}$ に対する条件は，式 (4.84) より

$$p_1^2 + p_3^2 + \cdots + p_{s-1}^2 = p_2^2 + p_4^2 + \cdots + p_s^2 \quad (4.85)$$

で与えられる（ただし，s は偶数）．自明な条件式

$$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1 \quad (4.86)$$

と合わせると，$s = 2$ でも解 $p_1 = p_2 = \frac{1}{2}$ が存在する．こうして，よく知られた 2 次の対称な近似式

$$S_2(x) = G\left(\frac{x}{2}\right)\tilde{G}\left(\frac{x}{2}\right) = F_1\left(\frac{x}{2}\right)\tilde{F}_1\left(\frac{x}{2}\right) \quad (4.87)$$

が再現される．

さらに，$s = 3$ とすると，パラメータ $\{p_j\}$ は式 (4.85) より，

$$p_1^2 + p_3^2 = p_2^2, \quad \text{および} \quad p_1 + p_2 + p_3 = 1 \quad (4.88)$$

の条件式をみたす．したがって，無数の実数解が存在する．特に，有理数解

$$p_1 = \frac{m-n}{2m}, \quad p_2 = \frac{m^2+n^2}{2m(m+n)}, \quad p_3 = \frac{n}{m+n} \quad (4.89)$$

が無数に存在する．ただし，m, n は $m(m+n) \neq 0$ をみたす任意の整数である[15, 17, 18]．例えば，$p_1 = 1/4, p_2 = 5/12, p_3 = 1/3$ は解である．すなわち，

$$F_2(x) = F_1\left(\frac{x}{4}\right)\tilde{F}_1\left(\frac{5}{12}x\right)F_1\left(\frac{x}{3}\right) \quad (4.90)$$

は有理数パラメータの非対称な 2 次分解公式になっている．

(v-b) 3 次の非対称な分解公式

一般論にしたがえば，3 次式に対するパラメータ $\{p_j\}$ を決める条件式は，$p_1+p_2+\cdots+p_s=1$ の他に，

$$\mathrm{SP}(Y_2)=0,\quad \mathrm{SP}(Y_3)=0,\quad \mathrm{SP}(Y_1Y_2)=0 \tag{4.91}$$

である．上の第 1 式は，

$$p_1^2+p_3^2+\cdots=p_2^2+p_4^2+\cdots \tag{4.92}$$

となり，第 2 式は

$$p_1^3+p_2^3+p_3^3+\cdots+p_s^3=0 \tag{4.93}$$

となる．上の第 3 式は少し複雑になる．すなわち，第 3 式の左辺は，操作 P と S の定義より，

$$\mathrm{SP}(Y_1Y_2)=\alpha(\{p_k\})\mathscr{H}R_2+\beta(\{p_k\})R_2\mathscr{H} \tag{4.94}$$

の形になる．ただし，

$$\alpha(\{p_k\})=\sum_{k=1}^{s}a_kp_k\ ;\ a_k=\sum_{j\,<\,k}(-1)^{j-1}p_j^2+\frac{1}{2}(-1)^{k-1}p_k^2, \tag{4.95}$$

および

$$\beta(\{p_k\})=\sum_{k=1}^{s}b_kp_k\ ;\ b_k=\sum_{j>k}(-1)^{j-1}p_j^2+\frac{1}{2}(-1)^{k-1}p_k^2 \tag{4.96}$$

である．式 (4.95) と条件式 $\mathrm{SP}(Y_1Y_2)=0$ より，

$$\alpha(\{p_k\})=0,\quad \text{および}\quad \beta(\{p_k\})=0 \tag{4.97}$$

という具体的な式が導かれる．

前節で説明した BCH 定理に基づく一般分解理論に比べて条件式は求め易いが，必要十分条件式ではないので，互いに独立でない条件式が現れることがあることに注意する必要がある．本節の定式化は，$\{A_j\}$ の数 r に依らないので，必要な条件式は，$p_1+p_2+\cdots+p_s=1$ の他には，前節の式 (4.27) より，$w(2)+w(3)=3$ 個のはずである．上に求めた条件式の数は 4 個であるから，どれか独立でない式が含まれている．実際に，式 (4.97) は，k によらず $a_k+b_k=0$ と書けるので，$\alpha(\{p_k\})$ と $\beta(\{p_k\})$ の間には，

$$\alpha(\{p_k\})+\beta(\{p_k\})=0 \tag{4.98}$$

という関係が成り立つ．したがって，式 (4.97) の 2 つの条件は，一つにまとめられ，第 1 式 $\alpha(\{p_k\})=0$ だけでよいことがわかる．こうして，上の 3 つの条

件式と

$$p_1 + p_2 + \cdots + p_s = 1 \tag{4.99}$$

との連立方程式を解いて，$\{p_j\}$ を求めればよいことになる．独立な条件式が全部で 4 個になるので，パラメータ $\{p_j\}$ の数 s は $s \geq 4$ でなければならない．しかし，$s = 4$ の場合には，実数解がない．そこで，$s = 5$ の場合について詳しく調べてみる．条件式 $\alpha(\{p_k\}) = 0$ は，条件式 (4.92), (4.93), (4.99) を用いて変形すると，

$$\alpha(\{p_k\}) = (p_1^2 - p_2^2)(p_2 + p_3) - p_5^2(p_4 + p_5) = 0 \tag{4.100}$$

となる．連立方程式 (4.92), (4.93), (4.99), (4.100) には，次の**有理数解**

$$p_1 = \frac{7}{24}, \quad p_2 = p_3 = \frac{3}{8}, \quad p_4 = -\frac{25}{24}, \quad p_5 = 1 \tag{4.101}$$

があることがわかる．実際，平方数の関係式 $7^2 + 24^2 = 25^2$ および立方数の関係式 $7^3 + 9^3 + 9^3 + 24^3 = 25^3$ などを用いて確かめられる（もちろん，この他にも無数の実数解が存在する）．このように，指数積公式の有理数解を求めることが，フェルマー（P. de Fermat）の大定理と関係する整数方程式論に帰着されることは興味深い[11, 15]．特に，この解を，$r = 2$ の場合，すなわち，$\exp[x(A + B)]$ の 3 次分解公式の場合に書き下すと，よく知られた **Ruth** の分解公式[22]

$$F_3^{(\mathrm{R})}(x) = \mathrm{e}^{\frac{7}{24}xA}\mathrm{e}^{\frac{2}{3}xB}\mathrm{e}^{\frac{3}{4}xA}\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}xB}\mathrm{e}^{-\frac{1}{24}xA}\mathrm{e}^{xB} \tag{4.102}$$

になっていることがわかる．

このように，順序付け操作 P と対称化操作 S を用いた指数積公式の一般論が大変有効であることがわかる[11, 15, 17~19]．この一般論では，指数演算子（いわば量子指数関数）の分解公式を構築するために，古典指数関数の特徴を生かす点において，**量子古典対応**の視点に立っている．

本節では，BCH 定理とその公式を用いずに，2 つの操作 P と S だけを用いる指数積公式の一般論とその具体的な応用例を説明した．次章では，非可換な関数の微分とテイラー展開に関する新しい方法，いわゆる「量子解析」とその指数積分解や BCH 公式への応用を解説する．

参考文献

1) 鈴木増雄，「手順の分離と統合—指数積分解，秩序形成およびエントロピー生成」，『数理物理　私の研究』（荒木不二洋/江口徹/大矢雅則編，丸善出版，2012）．
2) 例えば，Wikipedia の魔方陣の項目，http://ja.wikipedia.org/wiki/%E9%AD%94%E6%96%B9%E9%99%A3.
3) E. Hairer, C. Lubich and G. Wanner, *Geometric Numerical Integration* (Springer, 2006).
4) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **146**, 314 (1990); ibid. **165**, 387 (1992).

5) M. Suzuki, *J. Math. Phys.* **32**, 400 (1991).
6) M. Suzuki, *Physica A* **191**, 501 (1992); ibid. **194**, 432 (1993); ibid. **205**, 65 (1994).
7) K. Umeno and M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **181**, 387 (1993); M. Suzuki and K. Umeno, *Springer Proceedings in Physics* **76**, 74, edited by D.P. Landau *et al.* (1993).
8) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **163**, 491 (1994); *Rev. Math. Phys.* **8**, 487 (1996).
9) Z. Tsuboi and M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **9**, No.25, 3241 (1995). "リンドン語（Lyndon words)" を用いた数学的な論文.
10) H. Kobayashi, N. Hatano and M. Suzuki, *Physica A* **211**, 234 (1994).
11) 鈴木増雄,『統計力学』(岩波書店, 2000), 岩波オンデマンドブックス (2016 年 1 月).
12) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77, 477 (1976); ibid. **57**, 380 (1977), and ibid. *Suppl.* No.**64**, 402 (1978).
13) M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195 (1981).
14) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.**195**, 114 (2012).
この論文では, 佐藤–Guth の宇宙のインフレーションモデルとの関連性も議論している. また, 不可逆的な輸送現象におけるエントロピー生成についても論じている.
15) 大貫義郎, 鈴木増雄, 柏太郎,『経路積分の方法』(岩波書店, 2000) の第 6 章.
16) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **51**, 183 (1976), および **57**, 193 (1977).
17) M. Suzuki, *Phys. Lett. A* **165**, 387 (1992).
18) M. Suzuki, *Proc. Japan Acad.* **69**, Ser.B, 161 (1993).
19) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
20) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **61**, 3015 (1992).
21) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **17**, 1100 (1962).
22) R.D. Ruth, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* **NS-30**, 2669 (1983).

第 5 章
量子解析

5.1　非可換微分法と交換関係の計算公式

本章では**量子解析**[1~5]すなわち**非可換微分法**について解説する．まず，非可換微分法の定式化を行う．その際，古典的な微分法との対応関係が明瞭であることを主眼とする．ここでも，「量子古典対応」という視点で考える[1~5]．

5.1.1　量子解析の定式化のモチベーション

数理科学の多くの分野，特に量子物理学の分野では，非可換な演算子を扱うことが多い．量子力学や量子統計力学[1]では，それぞれ基礎方程式のハイゼンベルグ方程式やフォン・ノイマン方程式が交換関係を用いて表される．したがって，任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ との交換関係 $[f(A), g(B)]$ が A と B の交換子 $[A, B]$ を用いて簡潔に表されると大変便利である．また，摂動計算では，演算子関数 $f(A+B)$ を演算子 B で展開する必要に迫られる．これらの要求に答えようとして，筆者は「量子解析」を定式化した[2~5]．

5.1.2　量子微分の定義と公式

もともと，古典的な微分は，関数 $f(x)$ の変化率 $\Delta f(x)/\Delta x$ の極限として定義される：

$$f'(x) \equiv \frac{df(x)}{dx} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{\Delta f(x)}{\Delta x} = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x}. \qquad (5.1)$$

これは，次の全微分

$$df(x) \equiv \lim_{h \to 0} \frac{f(x+hdx) - f(x)}{h} = f'(x)dx \qquad (5.2)$$

の形に書き直すことができる．

演算子 A の関数 $f(A)$ に対しても，次のガトウ微分（Gâteaux differential）を定義することができる：

$$df(A) = \lim_{h \to 0} \frac{f(A + hdA) - f(A)}{h}. \tag{5.3}$$

しかし，古典的な微分 (5.2) の場合と異なり，量子的な微分 (5.3) の場合には，A と dA が一般に非可換であるために，式 (5.3) の内容は一変する．すなわち，$df(A)$ は（演算子）$\times\, dA$ の形の 2 つの演算子の積で表すことはできなくなるのである．例えば，簡単な演算子関数 $f(A) = A^2$ の場合でも，式 (5.3) は，

$$df(A) = dA^2 = \lim_{h \to 0} \frac{(A + hdA)^2 - A^2}{h} = A \cdot dA + (dA) \cdot A \tag{5.4}$$

となり，単純な 2 つの演算子の積の形にはならない．量子古典対応という視点に立って，古典的な微分の形 (5.2) にできる限り近い形で表すことを試みる．そのために，次のように定義される「**内部微分**」δ_A を導入する：任意の演算子 B に対して

$$\delta_A B = [A, B] \tag{5.5}$$

と定義する（δ_A のように演算子を他の演算子に変換する演算子を超演算子と呼ぶ）．この δ_A を「…微分」と呼ぶのは，微分の特徴である，次の**ライプニッツ（D.G. Leibniz）の規則**

$$\delta_A(BC) = (\delta_A B)C + B(\delta_A C) \tag{5.6}$$

をみたしているからである．これは，古典的なライプニッツの規則（任意の 2 つの関数 $f(x)$ と $g(x)$ の積の微分に関する関係式）

$$(f(x)g(x))' = f'(x)g(x) + f(x)g'(x) \tag{5.7}$$

の拡張になっている．

この超演算子 δ_A を用いると，式 (5.4) は

$$dA^2 = (2A - \delta_A)dA \tag{5.8}$$

と書ける．式 (5.8) のカッコの中の A を演算子 dA に左から A をかける超演算子 L_A と解釈すると，2 つの超演算子は互いに可換である：

$$A\delta_A \equiv L_A \delta_A = \delta_A L_A. \tag{5.9}$$

そこで，一般の演算子関数 $f(A)$ に対して，$df(A)$ を

$$df(A) = (A \text{ と } \delta_A \text{の関数})dA \tag{5.10}$$

の形で表すことにする．上式のカッコの中の超演算子を $f(A)$ の「量子微分」と呼び，古典的な微分と同様に

$$\frac{df(A)}{dA}$$

と書くことにする．したがって，

$$df(A)=\frac{df(A)}{dA}\cdot dA \tag{5.11}$$

と表せることになり，古典の場合との対応がつき便利である．しかし，中身は異質である．

こうして，前の簡単な例 $f(A)=A^2$ の場合には，

$$\frac{dA^2}{dA}=2A-\delta_A \tag{5.12}$$

となる．微分 dA が A と可換な場合（すなわち，本質的に古典的な場合）には，式 (5.12) の δ_A は零とみなせるので，古典的な微分 $2A$ に帰着される．このように，上の定式化では，量子古典対応が見易い．

次に，任意の正の整数 n に対して A^n の量子微分を求めよう．容易に

$$\begin{aligned} dA^n &= \lim_{h\to 0}\frac{(A+hdA)^n-A^n}{h}=\sum_{j=1}^{n}A^{j-1}(dA)A^{n-j} \\ &= \left(nA^{n-1}-\sum_{j=1}^{n}A^{j-1}\delta_{A^{n-j}}\right)\cdot dA\equiv\frac{dA^n}{dA}\cdot dA \end{aligned} \tag{5.13}$$

となることがわかり，量子微分 dA^n/dA が一応求まる[2]．しかし，この表示では内部微分の種類が多過ぎるので，δ_{A^m} を A と δ_A だけで表すことにする[2]．まず，右から A を作用させる操作 R_A と書くと，$R_AQ=QA$ であり δ_A は $\delta_A=L_A-R_A=A-R_A$ とも書ける．したがって，次の公式が成り立つ．

公式 5.1　任意の演算子関数 $f(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\delta_{f(A)}=f(L_A)-f(R_A)=f(A)-f(A-\delta_A). \tag{5.14}$$

この公式のように，R_A を用いずに，A と δ_A だけで量子微分を表すと，量子古典対応が一目瞭然となり便利である．これが量子解析の定式化の特徴である．すなわち，式 (5.13) の $\delta_{A^{n-j}}$ を A と δ_A を用いて

$$\delta_{A^{n-j}}=A^{n-j}-(A-\delta_A)^{n-j} \tag{5.15}$$

と書き換えると，

$$dA^n=\left(\sum_{j=1}^{n}A^{j-1}(A-\delta_A)^{n-j}\right)\cdot dA=\frac{A^n-(A-\delta_A)^n}{\delta_A}\cdot dA \tag{5.16}$$

となる．超演算子 δ_A の逆 δ_A^{-1} は存在しないが，A と δ_A は可換であるから，通常の数のように通分することができる．したがって，量子微分の定義式 (5.11) と比較すると，

$$\frac{dA^n}{dA}=\frac{A^n-(A-\delta_A)^n}{\delta_A} \tag{5.17}$$

が成り立つ．式 (5.14) を用いて，一般に次の**量子微分**の公式が導ける．

公式 5.2　任意の演算子関数 $f(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{df(A)}{dA}=\frac{f(A)-f(A-\delta_A)}{\delta_A}=\frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A}=\int_0^1 f^{(1)}(A-t\delta_A)dt. \quad (5.18)$$

ただし，$f^{(1)}(x)$ は通常の古典的な 1 階微分 (5.1) を表す．

公式 (5.18) には様々な興味深い特徴がある．まず第 1 に，量子微分 $df(A)/dA$ は 2 つの**内部微分** $\delta_{f(A)}$ と δ_A の比で表されることである．すなわち，それは超演算子の**差分形式**になっている．

第 2 に，それは，通常の古典的な微分を基に量子効果（すなわち，非可換性 δ_A）を積分の形で取り込んでいる．特に，式 (5.18) の最後の積分公式は，高次の量子微分を定式化する際にも重要となる表現形式であり，筆者の提唱した量子解析の大きな特色を与えるものである[1~5]．

また，ガトウ微分 $df(A)$ の定義式 (5.3) と量子微分の定義式 (5.11) とを統合し，任意の dA を改めて B とおき

$$f(A+xB)=f(A)+x\frac{df(A)}{dA}\cdot B+\mathrm{O}(x^2) \quad (5.19)$$

という 1 次のテイラー展開の形で捉えることができる．

5.1.3　ライプニッツの規則による量子微分の公式の導出

前に述べた通り，微分の基本的な性質は，抽象的には，それがライプニッツの規則 (5.6) または (5.7) をみたすことにある．したがって，逆に，この規則をみたす作用はすべて「一般化された微分」とみなすことができる．そこで，この立場で，再び量子微分の公式を導いてみよう．

量子微分 $df(A)/dA$ は式 (5.11) で定義されるので，ライプニッツの規則から，$df(A)$ と dA の関係を導くことにする．

恒等式 $Af(A)=f(A)A$ の全微分をとると，ライプニッツの規則より，

$$(dA)f(A)+Adf(A)=(df(A))A+f(A)dA \quad (5.20)$$

となる．これを内部微分 $\delta_A,\delta_{f(A)}$ を用いて書き直すと次式が得られる：

$$\delta_A df(A)=\delta_{f(A)}dA, \quad \therefore df(A)=\frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A}dA. \quad (5.21)$$

よって，量子微分の定義式 (5.11) より，再び，量子微分の公式 (5.18) が簡潔に導かれる[1~5]．この導出法は，後で示すように，高次の量子微分の公式を導く際には，特に有用である[1~5]．

5.1.4　量子微分の様々な公式とそれらの応用

演算子 A がパラメータ t（例えば時間）の関数 $A=A(t)$ の場合には，次の

公式が成り立つ．

公式 5.3　任意の演算子関数 $f(A)$ $(A = A(t))$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{d}{dt}f(A(t)) = \frac{df(A(t))}{dA(t)}\frac{dA(t)}{dt}. \tag{5.22}$$

証明　式 (5.22) の左辺の微分は通常の定義により，

$$\frac{df(A(t))}{dt} = \lim_{h\to 0}\frac{f(A(t+h)) - f(A(t))}{h} = \lim_{h\to 0}\frac{f(A(t)+hA'(t)) - f(A(t))}{h} \tag{5.23}$$

となる．式 (5.19) において $B = A'(t) \equiv dA(t)/dt$ とおくと，式 (5.23) より式 (5.22) が導かれる．

この公式は物理などによく応用されつつある[1~5]．

また，次の公式も容易に導ける．

公式 5.4　演算子関数の合成関数 $f(g(A))$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{df(g(A))}{dA} = \frac{df(g(A))}{dg(A)}\frac{dg(A)}{dA}. \tag{5.24}$$

証明　量子微分の公式 (5.18) より，式 (5.24) の右辺は

$$\frac{df(g(A))}{dg(A)}\frac{dg(A)}{dA} = \frac{\delta_{f(g(A))}}{\delta_{g(A)}}\frac{\delta_{g(A)}}{\delta_A} = \frac{\delta_{f(g(A))}}{\delta_A} = \frac{df(g(A))}{dA} \tag{5.25}$$

となり，式 (5.24) が示される．

また，次の公式も役立つことがある．

公式 5.5　任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(A)$ の積 $f(A)g(A)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\begin{aligned}\frac{d}{dA}(f(A)g(A)) &= f(A)\frac{dg(A)}{dA} + \frac{df(A)}{dA}(g(A) - \delta_{g(A)}) \\ &= \frac{df(A)}{dA}g(A) + \frac{dg(A)}{dA}(f(A) - \delta_{f(A)}).\end{aligned} \tag{5.26}$$

証明　容易に導ける関係式[1~5]

$$\delta_{f(A)g(A)} = f(A)\delta_{g(A)} + g(A)\delta_{f(A)} - \delta_{f(A)}\delta_{g(A)}$$

より明らかである．

5.1.5　交換関係の計算公式

量子微分の公式 (5.18) は，交換関係を具体的に計算するのに偉力を発揮する．公式 (5.18) より

$$\delta_{f(A)} = \frac{df(A)}{dA}\delta_A \tag{5.27}$$

という超演算子の関係式が導ける．これを任意の演算子 B に作用させて，交換関係 $[f(A), B]$ に対する表式

$$[f(A), B] = \delta_{f(A)}B = \frac{df(A)}{dA}[A, B] = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)[A, B]dt \tag{5.28}$$

が得られる．さらに，具体的に計算するには，$f^{(1)}(A - t\delta_A)$ を t でテイラー展開すればよい．すなわち，次の公式が得られる．

公式 5.6　任意の演算子関数に対して，次式が成り立つ：

$$[f(A), B] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n!} f^{(n)}(A)\delta_A^n B. \tag{5.29}$$

例えば，$f(A) = A^m$ とすると，

$$[A^m, B] = (A^m - (A - \delta_A)^m)B \tag{5.30}$$

である．

さらに，公式 5.6 は次の公式に一般化できる．

公式 5.7　任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ に対して，次式が成り立つ：

$$\begin{aligned}[f(A), g(B)] &= \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}[A, B] \\ &= \int_0^1 dt \int_0^1 ds f^{(1)}(A - t\delta_A)g^{(1)}(B - s\delta_B)[A, B]. \end{aligned} \tag{5.31}$$

証明　式 (5.27) より，

$$\begin{aligned}[f(A), g(B)] &= \delta_{f(A)}g(B) = \frac{df(A)}{dA}\delta_A g(B) = -\frac{df(A)}{dA}\delta_{g(B)}A \\ &= -\frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}\delta_B A = \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}\delta_A B = \frac{df(A)}{dA}\frac{dg(B)}{dB}[A, B] \end{aligned} \tag{5.32}$$

が成り立つ．

また，上の一般的な公式の特別の場合として次の公式が導ける．

公式 5.8　任意の 2 つの演算子関数 $f(A)$ と $g(B)$ に対して，交換子 $[A, B]$ が A とも B とも可換なとき，次式が成り立つ：

$$[f(A), g(B)] = -\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} f^{(n)}(A)g^{(n)}(B)[B, A]^n. \tag{5.33}$$

証明　公式 5.7 より，上記の条件 $\delta_A[A, B] = 0$, $\delta_B[A, B] = 0$ を用いて，

$$[f(A), g(B)] = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A) g^{(1)}(B)[A, B] dt$$
$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int_0^1 t^n dt\, f^{(n+1)}(A) \big((-\delta_A)^n g^{(1)}(B)\big)[A, B]. \tag{5.34}$$

ここで，公式 5.6 を用いると，上記の条件 $\delta_B[A, B] = 0$ より，

$$(-\delta_A) g^{(1)}(B) = [g^{(1)}(B), A] = \int_0^1 g^{(2)}(B - t\delta_B)[B, A] dt = g^{(2)}(B)[B, A] \tag{5.35}$$

となる．これを n 回くり返して，

$$(-\delta_A)^n g^{(1)}(B) = g^{(n+1)}(B)[B, A]^n \tag{5.36}$$

が得られる．これを式 (5.34) に代入すると，公式 5.8 が導かれる．

この公式 5.8 の具体的な応用例として，例えば，$f(A) = \mathrm{e}^{xA}$, $g(B) = \mathrm{e}^{yB}$ とすると，次の公式が得られる．

公式 5.9　$\delta_A[A, B] = 0$ および $\delta_B[A, B] = 0$ のとき，次式が成り立つ：

$$[\mathrm{e}^{xA}, \mathrm{e}^{yB}] = \mathrm{e}^{xA}\mathrm{e}^{yB}(1 - \mathrm{e}^{xy[B,A]}). \tag{5.37}$$

物理への応用としては，運動量 p と座標 q に関する交換関係 $[\mathrm{e}^{xq}, \mathrm{e}^{yp}]$ が，交換子 $[q, p] = \mathrm{i}\hbar$ を用いて，次のように簡単に決まる：

$$[\mathrm{e}^{xq}, \mathrm{e}^{yp}] = (1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hbar xy})\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp}. \tag{5.38}$$

この関係式は

$$\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar xy}\mathrm{e}^{yp}\mathrm{e}^{xq} \tag{5.39}$$

と等価であり，これは直接導くことも容易である．すなわち，式 (5.39) の両辺に右から e^{-xq} をかけた式が，$\delta_q^n p = 0$ $(n = 2, 3, \cdots)$ を用いて次のように示せる：

$$\mathrm{e}^{xq}\mathrm{e}^{yp}\mathrm{e}^{-xq} = \exp(y\mathrm{e}^{xq}p\mathrm{e}^{-xq}) = \exp(y\mathrm{e}^{x\delta_q}p)$$
$$= \exp(y(p + x\delta_q p)) = \exp(yp + \mathrm{i}\hbar xy) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hbar xy}\mathrm{e}^{yp}. \tag{5.40}$$

5.1.6　非平衡統計物理学への応用例——フォン・ノイマン方程式の変換

非平衡統計物理学において，体系の時間発展を記述する基礎方程式は，次の密度行列 $\rho(t)$ に関するフォン・ノイマン方程式である[1)]：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}(t), \rho(t)]. \tag{5.41}$$

ここで，$\mathscr{H}(t)$ は系のハミルトニアンである．この方程式に従う密度行列 $\rho(t)$ を用いて，系の様々の物理量の時間変化を求めることができる．例えば，エントロピー演算子 $\eta(t) = k_{\rm B}\log\rho(t)$ も式 (5.41) と同形の方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\eta(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}(t), \eta(t)] \tag{5.42}$$

をみたすことが知られている[1]．一般に，$\rho(t)$ の任意の関数 $f(\rho(t))$ が式 (5.41) と同じ方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))] \tag{5.43}$$

をみたす（いわば不変形式になっている）ことが，量子微分の公式 (5.18) と (5.21) を用いて次のように簡潔に示せる：

$$\begin{aligned}\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}f(\rho(t)) &= \mathrm{i}\hbar\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\frac{d\rho(t)}{dt} = \frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\mathscr{H}(t)}\rho(t) \\ &= -\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\rho(t)}\mathscr{H}(t) = -\delta_{f(\rho(t))}\mathscr{H}(t) = [\mathscr{H}(t), f(\rho(t))].\end{aligned} \tag{5.44}$$

ここで，式 (5.27)，すなわち，

$$\frac{df(\rho(t))}{d\rho(t)}\delta_{\rho(t)} = \delta_{f(\rho(t))} \tag{5.45}$$

が有効に使われている．

ちなみに，線形応答の理論[6]で使われる**久保の恒等式**

$$\begin{aligned}[A, \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}] &= \mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \mathrm{e}^{\lambda\mathscr{H}}[\mathscr{H}, A]\mathrm{e}^{-\lambda\mathscr{H}}d\lambda \\ &= \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \mathrm{e}^{\lambda\mathscr{H}}\dot{A}\mathrm{e}^{-\lambda\mathscr{H}}d\lambda \equiv \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}\int_0^\beta \dot{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda)d\lambda\end{aligned} \tag{5.46}$$

も量子微分の式 (5.27)，すなわち，

$$\delta_{\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}A = \frac{d\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{d\mathscr{H}}\delta_{\mathscr{H}}A \tag{5.47}$$

に他ならない．

本節では，演算子関数の量子解析，すなわち量子古典対応に主眼を置いた量子微分の基本的な公式とその簡単な応用を解説した．特に，交換関係 $[f(A), g(B)]$ の計算公式について丁寧に説明し，そのいくつかの応用例にふれた．また，非平衡統計物理学の基礎方程式であるフォン・ノイマン方程式は，密度行列の任意の関数に対しても同様に成り立つ，すなわち不変形式になっていることが量子解析を用いると容易に示されることがわかった．これは，熱場ダイナミクス[7,8]で $\rho(t)^{1/2}$ の時間変化などを扱う際などには特に重要である．次節では高階の量子微分を導入し，演算子の関数 $f(A + xB)$ の量子テイラー展開とその応用について解説する．

5.2　高階の量子微分と量子テイラー展開

本節ではいろいろな角度から高階の量子微分を導入し，それを用いて演算子関数 $f(A+xB)$ の量子テイラー展開の一般公式を定式化する．すなわち，セザンヌ，マチス，ピカソなどの絵のように

「多視点で（いろいろと視点座標系を変えながら）」

量子微分を定式化する．

5.2.1　量子ライプニッツ規則による高階量子微分の定式化

前節では 1 階の量子微分をいくつかの方法で導入した．その中でも，古典的なライプニッツの規則 (5.7) の量子版 (5.6) を基にした定式化は，わかり易く一般性があり，高階の量子微分を導入するのに大変適している．そもそも，古典的なライプニッツの規則 (5.7) は，微分形式で書くと，その可換性より

$$d(fg) = gdf + fdg \tag{5.48}$$

と書くこともできる．量子解析では，演算子 A と微分 dA とが非可換であるから，$g(A)$ と $df(A)$ との順序も本質的に重要となり，

$$d(f(A)g(A)) = (df(A))g(A) + f(A)dg(A) \tag{5.49}$$

としなければならない．これを「量子ライプニッツ規則」と呼ぶことにする．まず，この量子ライプニッツ規則を基にして高階量子微分の表式を求めることにする．第 5.1.3 項で説明した 1 階量子微分の導出法をもう一度簡単に復習しておく．恒等式 $Af(A) = f(A)A$ の両辺の全微分をとると，

$$[A, df(A)] = [f(A), dA] \tag{5.50}$$

となる．すなわち，$\delta_A df(A) = \delta_{f(A)} dA$ と書き直せるので，$df(A)$ は

$$df(A) = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A} dA \tag{5.51}$$

と表される．さらに，式 (5.50) の全微分をとると，$d^2A = 0$ より，再び量子ライプニッツ規則を用いて，

$$[dA, df(A)] + [A, d^2f(A)] = [df(A), dA], \tag{5.52}$$

すなわち，

$$\delta_A d^2 f(A) = 2[df(A), dA] \tag{5.53}$$

が得られる．こうして，$d^2 f(A)$ が $df(A)$ を用いて表される．これをくり返すと，一般の正の整数 n に対して

$$\delta_A d^n f(A) = n[d^{n-1} f(A), dA] \tag{5.54}$$

という重要な漸化式が求まる[2]．この漸化式のままでは，抽象的で扱いにくいので，もう少し具体的な表現形式に関する漸化式に変換しよう．古典的な微分と同様に，n 階微分 $d^n f(A)$ は n 次の微小演算子 $(dA)^n$ を n 階の量子微分 $d^n f(A)/dA^n$ で変換したものと解釈する：

$$d^n f(A) = \frac{d^n f(A)}{dA^n} \cdot (dA)^n. \tag{5.55}$$

ここで，$d^n f(A)/dA^n$ は，通常の演算子の組 $(dA, dA, \cdots, dA)$ を演算子の関数に変換する「**超演算子**」である．このままでは，この超演算子は抽象的過ぎて実用的でなく，式 (5.55) の意味もあいまいである．そこで，次のような n 個の「内部微分」$\delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_n$ を導入する：

$$\delta_j (dA)^n \equiv (dA)^{j-1} (\delta_A dA)(dA)^{n-j}. \tag{5.56}$$

これらの超演算子 $\{\delta_j\}$ と $A(\equiv L_A)$ を用いて，n 階の量子微分を次のように表すことにする：

$$\frac{d^n f(A)}{dA^n} = n! g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n). \tag{5.57}$$

この表記法を用いると，式 (5.55) は単に

$$d^n f(A) = n! g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)(dA)^n \tag{5.58}$$

と書けるので，漸化式 (5.54) は，**超演算子関数** $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)$ の漸化式に次のように書き換えられる：

$$\begin{aligned} g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)\delta_A (dA)^n &= -\delta_{dA}(g_{n-1}(A, \delta_1, \cdots, \delta_{n-1})(dA)^{n-1}) \\ = g_{n-1}(A, \delta_1, \cdots, \delta_{n-1})(dA)^n &- (dA) g_{n-1}(A, \delta_1, \cdots, \delta_{n-1})(dA)^{n-1} \end{aligned} \tag{5.59}$$

ここで，A と $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)$ は互いに可換であることを用いた．さらに，式 (5.14) すなわち，公式

$$\delta_{f(A)} = f(A) - f(A - \delta_A), \tag{5.60}$$

または，

$$(dA) f(A) = f(A - \delta_A) dA \tag{5.61}$$

を用いると，式 (5.59) より，次の漸化式が得られる：

$$\begin{aligned} &(\delta_1 + \cdots + \delta_n) g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n) \\ &= g_{n-1}(A, \delta_1, \cdots, \delta_{n-1}) - g_{n-1}(A - \delta_1, \delta_2, \cdots, \delta_n). \end{aligned} \tag{5.62}$$

ただし，次の公式

$$\delta_A(dA)^n = (\delta_A dA)(dA)^{n-1} + (dA)(\delta_A dA)(dA)^{n-2} + \cdots + (dA)^{n-1}\delta_A dA$$
$$= (\delta_1 + \delta_2 + \cdots + \delta_n)(dA)^n \tag{5.63}$$

を用いた．

次に，初期条件

$$g_1(A, \delta_1) = \frac{df(A)}{dA} = \frac{f(A) - f(A - \delta_1)}{\delta_1} \tag{5.64}$$

から出発し，漸化式 (5.62) を用いて，**超演算子関数** $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n)$ のあらわな表式を求めよう．ここで，$A, \{\delta_j\}$ はどれも互いに可換であるから，$\{g_m(A, \delta_1, \cdots, \delta_m)\}$ は通常の関数のように扱って計算できる．これは，量子解析の定式化の大きな利点の一つである．

まず，2 階の量子微分の表式から始めよう．式 (5.62) より，

$$g_2(A, \delta_1, \delta_2) = \frac{1}{\delta_1 + \delta_2}(g_1(A, \delta_1) - g_1(A - \delta_1, \delta_2))$$
$$= \frac{1}{\delta_1 + \delta_2}\left(\frac{f(A) - f(A - \delta_1)}{\delta_1} - \frac{f(A - \delta_1) - f(A - \delta_1 - \delta_2)}{\delta_2}\right)$$
$$= \frac{f(A) - f(A - \delta_1)}{\delta_1 \delta_2} - \frac{f(A) - f(A - \delta_1 - \delta_2)}{(\delta_1 + \delta_2)\delta_2} \tag{5.65}$$

が得られる．1 階の量子微分は積分表示すると，大変簡潔で実用的になり，しかも古典的な n 階微分 $f^{(n)}(x)$ との関係も直接的になる[2)]：

$$g_1(A, \delta_1) = \frac{f(A) - f(A - \delta_1)}{\delta_1} = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_1)dt. \tag{5.66}$$

そこで，2 階の量子微分も古典的な 2 階微分 $f^{(2)}(x)$ の 2 重積分で表示してみると，次のようになることが容易にわかる[2)]：

$$g_2(A, \delta_1, \delta_2) = \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 f^{(2)}(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2). \tag{5.67}$$

このようにして，一般の n 階量子微分は，古典的な n 階微分 $f^{(n)}(x)$ の n 重積分を用いて次のように表されることが容易に証明できる[2)]：

公式 5.10（n **階量子微分の公式**） 超演算子関数 $g_n(A, \delta_1, \cdots, \delta_n) \equiv \frac{1}{n!}\frac{d^n f(A)}{dA^n}$ に対して，次式が成り立つ：

$$\frac{1}{n!}\frac{d^n f(A)}{dA^n}$$
$$= \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n f^{(n)}(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2 - \cdots - t_n\delta_n) \tag{5.68}$$

これらの表式を用いると，次の項で説明するように互いに非可換な演算子 A と B の関数 $f(A + xB)$ の x に関するテイラー展開（いわゆる**量子テイラー展開**）

ができる[2)].

5.2.2 量子テイラー展開の公式[2)]

数学や物理では，互いに非可換な演算子 A と B の和 $(A+xB)$ の関数 $f(A+xB)$ を x でテイラー展開する必要に迫られることがよくある．今までは，そのつど，その関数の特徴を利用したうまい工夫により，テイラー展開の公式が発見されてきた．例えば，もっともよく知られているのは，次の**レゾルベント展開**の公式である：

$$\frac{1}{A+xB} = \frac{1}{A} - x\frac{1}{A}B\frac{1}{A+xB}$$
$$= \frac{1}{A} - x\frac{1}{A}B\frac{1}{A} + x^2\frac{1}{A}\left(B\frac{1}{A}\right)^2 + \cdots + (-x)^n\frac{1}{A}\left(B\frac{1}{A}\right)^n + \cdots . \tag{5.69}$$

また，物理でよく用いられるテイラー展開は指数演算子 e^{A+xB} の展開公式（**ファインマンの公式**）である[1)]：

$$\mathrm{e}^{t(A+xB)} = \mathrm{e}^{tA}\left(1 + x\int_0^t \mathrm{e}^{-t_1A}B\mathrm{e}^{t_1(A+xB)}dt_1\right)$$
$$= \mathrm{e}^{tA}\left(1 + x\int_0^t B(t_1)dt_1 + x^2\int_0^t dt_1\int_0^{t_1} dt_2 B(t_1)B(t_2) + \cdots \right.$$
$$\left. + x^n\int_0^t dt_1\int_0^{t_2} dt_2\cdots\int_0^{t_{n-1}} dt_n B(t_1)B(t_2)\cdots B(t_n) + \cdots\right). \tag{5.70}$$

ただし，

$$B(t) = \mathrm{e}^{-tA}B\mathrm{e}^{tA} \tag{5.71}$$

である．式 (5.70) で $t=1$ とおくと，e^{A+xB} の展開公式となるのは自明である．パラメータ t を入れておくと，式 (5.70) の第 1 行目の等式が証明し易くなる（すなわち，両辺を t で微分した式が等しいことを示せばよい）．

さて，A と B が互いに可換な場合には，A を x，B を y とおいて古典的な微分 $D \equiv d/dx$ を用いると，$f(x+y)$ のテイラー展開は

$$f(x+y) = \mathrm{e}^{yD}f(x) = f(x) + f^{(1)}(x)y + \cdots + \frac{f^{(n)}(x)}{n!}y^n + \cdots \tag{5.72}$$

となることはよく知られている通りである．これに対応して，非可換演算子の関数 $f(A+xB)$ の場合には次の公式が成り立つ．

公式 5.11（量子テイラー展開の一般公式） 非可換演算子の関数 $f(A+xB)$ に対して，次式が成り立つ：

$$f(A+xB) = f(A) + \sum_{n=1}^{\infty}\frac{x^n}{n!}\frac{d^n f(A)}{dA^n}B^n. \tag{5.73}$$

ただし，n 階量子微分 $d^n f(A)/dA^n$ は式 (5.68) で与えられ，その中の $\{\delta_j\}$ は量子テイラー展開の公式の場合には，

$$\delta_j B^n = B^{j-1}(\delta_A B)B^{n-j} \tag{5.74}$$

と解釈する[2)]．

5.2.3 指数演算子の量子テイラー展開

指数演算子のテイラー展開 (5.70) を一般公式 (5.73) から導いてみよう．指数関数 $f(x) = \mathrm{e}^x$ の古典的 n 階微分 $f^{(n)}(x)$ は $f^{(n)}(x) = \mathrm{e}^x$ で変わらないので，式 (5.70) では，“微分” があらわに見えず “積分” だけで高次の展開が表されており，一見奇異な感じがする．

さて，指数演算子 $\exp(A + xB)$ の量子テイラー展開の x^n の係数は，一般公式 (5.73) と式 (5.68) より，

$$\begin{aligned}&\frac{1}{n!}\frac{d^n \mathrm{e}^A}{dA^n}B^n \\ &= \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n \exp(A - t_1\delta_1 - t_2\delta_2 - \cdots - t_n\delta_n)B^n\end{aligned} \tag{5.75}$$

となる．そこで，上式の右辺の積分の中の部分を，よりわかり易い形に書き直す．ここで，$A, \{\delta_j\}$ は互いに可換であるから，

$$\begin{aligned}\exp(A - t_1\delta_1 - \cdots - t_n\delta_n)B^n &= \mathrm{e}^A(\mathrm{e}^{-t_1\delta_1}B)(\mathrm{e}^{-t_2\delta_2}B)\cdots(\mathrm{e}^{-t_n\delta_n}B) \\ &= \mathrm{e}^A B(t_1)B(t_2)\cdots B(t_n)\end{aligned} \tag{5.76}$$

と書き換えられる．ただし，次の公式（両辺を t で展開し両辺が等しいことより確かめられる）を用いた：

$$\mathrm{e}^{-t\delta_A}B = \mathrm{e}^{-tA}B\mathrm{e}^{tA} \equiv B(t). \tag{5.77}$$

こうして，量子テイラー展開の一般公式 (5.73) と式 (5.68) より，よく知られた指数演算子の量子テイラー展開公式 (5.70)（正確には $t = 1$ とした式）が導ける．

実は，指数演算子の量子テイラー展開公式は，量子テイラー展開の一般論にとっても特別に重要な意味を持っている[2)]．それは逆に，表式 (5.75) から，一般の演算子関数 $f(A)$ に対する量子テイラー展開の式 (5.68) と式 (5.73) を導くことができるからである[2)]．すなわち，一般の関数を指数関数で展開し，各項に，式 (5.75) を適用し，再び全体をまとめると一般公式が得られる[2)]．また，一般に高階量子微分が多重積分で表せるのではないかというヒントはファインマンの公式 (5.70) の美しさへの筆者の強い思いにあった．

5.2.4 差分の極限としての高階量子微分

前節の式 (5.3)，すなわち，差分の極限

$$df(A) = \lim_{h\to 0} \frac{f(A+hdA)-f(A)}{h} \tag{5.78}$$

として定義される量子微分をくり返し用いることにより，高階の量子微分を導入することもできる[2)]．まず，2 階の量子微分 $d^2f(A)$ は，

$$\begin{aligned} d^2f(A) &= \lim_{h_2\to 0} \frac{df(A+h_2dA)-df(A)}{h_2} \\ &= \lim_{h_2\to 0}\lim_{h_1\to 0} \frac{1}{h_2}\left(\frac{f(A+h_2dA+h_1dA)-f(A+h_2dA)}{h_1}\right. \\ &\qquad \left. - \frac{f(A+h_1dA)-f(A)}{h_1}\right) \end{aligned} \tag{5.79}$$

となる．ここで，$h_1 = h_2 = h$ として極限をとっても同じ結果になるので，2 階の量子微分は

$$\begin{aligned} d^2f(A) &= \lim_{h\to 0} \frac{1}{h^2}\big(f(A+2hdA)-2f(A+hdA)+f(A)\big) \\ &= \lim_{h\to 0} \frac{1}{h^2}\big(f(A+hdA)-2f(A)+f(A-hdA)\big) \end{aligned} \tag{5.80}$$

と定義することもできる．一般の正の整数 n に対しては，

$$d^nf(A) = \lim_{h\to 0} \sum_{j=0}^{n} \frac{(-1)^{n-j}}{h^n}\binom{n}{j} f(A+jhdA) \tag{5.81}$$

と定義できる[2)]．この定義を用いて，n 階量子微分の公式 **5.10** を導くことも容易にできる[2)]．

5.2.5 複素積分表示を用いた高階量子微分の定式化

演算子 A が有界，すなわち，固有値がすべて有限であれば，複素 z 平面上の十分大きな積分路 C を用いて，演算子関数 $f(A)$ は次のダンホード (**Dunford**) **積分**で表される：

$$f(A) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\mathrm{C}} \frac{f(z)}{z-A} dz. \tag{5.82}$$

ただし，積分路 C は原点のまわりに反時計回りにとるものとし，その円の中に A の固有値がすべて含まれるものとする．演算子 B も有界であれば，レゾルベント展開公式 (5.69) を用いて，$f(A+xB)$ は，

$$\begin{aligned} f(A+xB) &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\mathrm{C}} \frac{f(z)}{z-(A+xB)} dz \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\mathrm{C}} \frac{f(z)}{z-A}\left(B\frac{1}{z-A}\right)^n dz \end{aligned}$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{x^n}{2\pi \mathrm{i}} \int_{\mathrm{C}} dz \frac{f(z)}{(z-A)(z-A+\delta_1)\cdots(z-A+\delta_1+\delta_2+\cdots+\delta_n)} B^n$$

$$= \sum_{n=0}^{\infty} x^n \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n f^{(n)}(A - t_1\delta_1 - \cdots - t_n\delta_n) B^n \tag{5.83}$$

と表される[2)]（最後の式の導出には，数学的帰納法を用いるとよい）．こうして，再び，量子テイラー展開の一般公式 (5.73)（および式 (5.68)）が導ける．上の式の変形には，次の公式を用いた[2)]：

$$B\frac{1}{z-A} = \frac{1}{z-A+\delta_A}B = \frac{1}{z-A+\delta_1}B,$$

$$\left(B\frac{1}{z-A}\right)^2 = \left(\frac{1}{z-A+\delta_A}B\right)\left(\frac{1}{z-A+\delta_A}B\right)$$

$$= \frac{1}{z-A+\delta_1}B\frac{1}{z-A+\delta_2}B$$

$$= \frac{1}{(z-A+\delta_1)(z-A+\delta_1+\delta_2)}B^2,$$

$$\vdots$$

$$\left(B\frac{1}{z-A}\right)^n$$

$$= \frac{1}{(z-A+\delta_1)(z-A+\delta_1+\delta_2)\cdots(z-A+\delta_1+\cdots+\delta_n)}B^n. \tag{5.84}$$

このように，量子テイラー展開の公式は，いろいろな方法で導くことのできる一般的な公式であり，大変有用である．非可換な演算子の関数の高階量子微分や量子テイラー展開が，互いに可換な「超演算子」で表されることは，量子解析の大きな特徴であり利点である[2)]．

5.2.6 量子（情報）エントロピーの理論に役立つ対数関数の量子テイラー展開

指数演算子や分数演算子の他に，対数演算子 $\log(A+xB)$ の量子テイラー展開も量子統計力学[2)]や量子情報理論などでは必要になる．量子テイラー展開の一般公式より，容易に次の公式が導ける：

$$\log(A+xB) = \log A + \int_0^1 \frac{x}{A-t\delta_A} dt \cdot B + \cdots$$

$$= \log A - x\left(\delta_A^{-1} \log\left(1 - A^{-1}\delta_A\right)\right) B + \cdots$$

$$= \log A + x\int_0^{\infty} \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt + \cdots . \tag{5.85}$$

上式の最後の積分表示は，次のようにして導かれる[4,9)]：

$$\log(A+xB) = \int_0^{\infty} \left(\frac{1}{t+1} - \frac{1}{t+A+xB}\right)dt$$

$$= \int_0^\infty \left(\frac{1}{t+1} - \frac{1}{t+A}\right)dt + x\int_0^\infty \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt + \mathrm{O}(x^2)$$
$$= \log A + x\int_0^\infty \frac{1}{t+A}B\frac{1}{t+A}dt + \mathrm{O}(x^2). \tag{5.86}$$

上の積分の中の $(t+1)^{-1}$ の項は，積分の $t \to \infty$ での収束のためのものである．

本節では，高階量子微分の多重積分による公式とそれを用いた量子テイラー展開の一般公式の様々な視点からの定式化を解説した．次節からは，指数演算子の高次分解公式，すなわち計算物理の基礎公式に関する問題などを量子微分および量子微分方程式を用いて議論する．

5.3 量子微分方程式による BCH 公式の再考

本節では，量子的関数（すなわち非可換演算子の関数）の微分方程式をわざわざ作り，この微分方程式の構造から，もとの量子的関数の特性を知る方法を説明する．その典型的な例として，いくつかの指数演算子の積を一つの指数演算子にまとめる BCH 公式を，この量子微分方程式を用いて簡潔に導く方法などを解説する．この新しい方法が従来の方法と比べて，いかに有効であるかを示す．

5.3.1 抽象的思考と具体的解法—その分離と統合

数学の命題の中には，方程式の解の存在定理のように解法そのものにはふれずに解の存在だけを証明するという極めて抽象性の高いものが多い（n 次整方程式は n 個の解を持つという代数学の基本定理は整関数論の美しい定理の一つである．しかし，具体的な解法は一般には 4 次方程式までである）．このように概念的に見事な定理は，サイエンスの応用の面でもまた極めて重要である．これは，厳密解は求まらない場合でも近似解を求める指針を与えてくれる．

ここで取り扱う指数演算子の例で言えば，BCH 公式がその典型的な美しい命題である．すなわち，互いに非可換な演算子 $\{A_j; j = 1, 2, \cdots, r\}$ に対して，次のように，指数積を一つの**指数演算子**

$$\mathrm{e}^{A_1}\mathrm{e}^{A_2}\cdots\mathrm{e}^{A_r} = \mathrm{e}^{\Phi} \tag{5.87}$$

にまとめると，「Φ は，$(A_1 + A_2 + \cdots + A_r)$ に加えて，$\{A_j\}$ の交換子の線形結合で表される」ことが数学的な背理法で証明されている．従来は，補遺で示すように，この定理を頼りに，式 (5.87) の左辺を $\{A_j\}$ に関して強引に展開し，それらを次数の低い項から DSW 定理を用いて交換子に書き直していた．

これから説明する「量子微分方程式の方法」は，BCH の線形性の定理も，具体的表式を一般的に与えることによって，同時に示すことができる．これは，言わば，「抽象的思考と具体的解法の統合」である．

5.3.2 量子微分方程式の方法（量子解析[1~3,5,10]）

式 (5.87) のような代数的な関係式によって定義される演算子 Φ の特徴をうまく捉えたあらわな表式を求める一つの方法は，演算子 Φ に関する，(5.88) のような微分方程式を導き，それを解くことである．そのために，パラメータ x の関数演算子 $A_1(x), \cdots, A_r(x)$ を考え，演算子 $\Phi(x)$ はこれらの演算子の関数で表されるものとする．

一般に，$\Phi(x)$ の x に関する微分が，**内部微分** $\delta_{\Phi(x)}, \delta_{A_1(x)}, \cdots, \delta_{A_r(x)}$ の関数を演算子 $\{B_j; j = 1, \cdots, r\}$ に作用させた形

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \sum_{j=1}^{r} f_j(\delta_{\Phi(x)}; \delta_{A_1(x)}, \cdots, \delta_{A_r(x)})\ B_j(x) \tag{5.88}$$

に表される状況を考える．ただし，$\{B_j(x)\}$ は $\{A_j(x)\}$ または $\{dA_j(x)/dx\}$ である．これを一般に「量子微分方程式」と呼ぶことにする．式 (5.88) の右辺に現れる内部微分は一種の量子微分である．

量子微分方程式 (5.88) の一般的解法などは，まだ開発されていないが，例えば，$\Phi(x)$ が条件式

$$e^{A_1(x)} e^{A_2(x)} \cdots e^{A_r(x)} = e^{\Phi(x)} \tag{5.89}$$

で与えられるときのように，内部微分 $\delta_{\Phi(x)}$ が $\{\delta_{A_j(x)}\}$ を用いて表される場合には，式 (5.88) は

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \sum_{j=1}^{r} f_j(\{\delta_{A_j(x)}\}) B_j(x) \tag{5.90}$$

のような，より簡単な**量子微分方程式**に変換される．これは，容易に積分することができて，

$$\Phi(x) = \sum_{j=1}^{r} \int_{x_0}^{x} f_j(\{\delta_{A_j(t)}\}) B_j(t) dt + \Phi(x_0) \tag{5.91}$$

となる．したがって，$\Phi(x)$ が量子微分方程式 (5.90) をみたすことがわかれば，$\Phi(x) - \Phi(x_0)$ は交換子の線形結合で表されることが問題の具体的な解き方と同時に示される．

実際，条件式 (5.89) の場合には，$\delta_{\Phi(x)}$ は $\{\delta_{A_j(x)}\}$ で表されることが次のように示される[3]．

公式 5.12　条件式 (5.89) の下に，内部微分 δ_Φ と $\{\delta_{A_j}\}$ の間に，次の関係式が成り立つ：

$$e^{\delta_\Phi} = e^{\delta_{A_1}} e^{\delta_{A_2}} \cdots e^{\delta_{A_r}}. \tag{5.92}$$

ただし，内部微分 δ_A は任意の演算子 Q に対して，次の式をみたす．

$$\delta_A Q = [A, Q] = AQ - QA \text{ および } e^{\delta_A} Q = e^A Q e^{-A}. \tag{5.93}$$

証明　任意の演算子 Q に対して，次式が成り立つことより明らかである（パラメータ x は省略した）：

$$\begin{aligned} e^{\delta_\Phi}Q &= e^{\Phi}Qe^{-\Phi} \\ &= e^{A_1}e^{A_2}\cdots e^{A_r}Qe^{-A_r}\cdots e^{-A_2}e^{-A_1} \\ &= e^{A_1}(e^{A_2}(\cdots(e^{A_r}Qe^{-A_r})\cdots)e^{-A_2})e^{-A_1} \\ &= e^{\delta_{A_1}}e^{\delta_{A_2}}\cdots e^{\delta_{A_r}}Q. \end{aligned} \tag{5.94}$$

5.3.3　量子微分方程式による BCH 公式の導出

式 (5.89) で与えられる演算子 $\Phi(x)$ を $\{A_j(x)\}$ の交換子の線形結合で表す公式が BCH 公式である．それを導くため，式 (5.89) の両辺を x で微分すると，

$$\frac{de^{\Phi(x)}}{d\Phi(x)}\cdot\frac{d\Phi(x)}{dx} = \sum_{j=1}^{r} e^{A_1(x)}\cdots\left(\frac{d}{dx}e^{A_j(x)}\right)\cdots e^{A_r(x)} \tag{5.95}$$

となる．ここで，量子微分の公式[1~3,10]

$$\frac{de^{\Phi(x)}}{d\Phi(x)} = e^{\Phi(x)}\Delta(-\Phi(x)) = e^{\Phi(x)}e^{-\delta_{\Phi(x)}}\Delta(\Phi(x)) \tag{5.96}$$

および

$$\Delta(A) = \frac{e^{\delta_A}-1}{\delta_A} \tag{5.97}$$

を用いると，式 (5.95) は，

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \frac{1}{\Delta(-\Phi(x))}\times e^{-\Phi(x)}\sum_{j=1}^{r} e^{A_1(x)}\cdots\left(\frac{d}{dx}e^{A_j(x)}\right)\cdots e^{A_r(x)} \tag{5.98}$$

と書ける．さらに，条件式 (5.89) の逆演算の公式

$$e^{-\Phi(x)} = e^{-A_r(x)}\cdots e^{-A_2(x)}e^{-A_1(x)} \tag{5.99}$$

を用いると，式 (5.98) は

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi(x)}{dx} &= \frac{1}{\Delta(-\Phi(x))}\sum_{j=1}^{r} e^{-A_r(x)} \\ &\quad\times\left(\cdots e^{-A_{j+1}(x)}\left(e^{-A_j(x)}\frac{de^{A_j(x)}}{dx}\right)\cdots e^{A_{j+1}(x)}\cdots\right)e^{A_r(x)} \\ &= \frac{1}{\Delta(-\Phi(x))}\sum_{j=1}^{r} e^{-\delta_{A_r(x)}}\cdots e^{-\delta_{A_{j+1}}}\left(e^{-A_j(x)}\frac{de^{A_j(x)}}{dA_j(x)}\cdot\frac{dA_j(x)}{dx}\right) \end{aligned} \tag{5.100}$$

となる．ここで，再び公式 (5.93) を用いた．さらに量子微分の公式 (5.96) と (5.97) を用いると，式 (5.100) は

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} = \frac{1}{\Delta(\Phi(x))}\sum_{j=1}^{r} \mathrm{e}^{\delta_{A_1(x)}}\cdots \mathrm{e}^{\delta_{A_{j-1}(x)}}\Delta(A_j(x))\frac{dA_j(x)}{dx} \qquad (5.101)$$

と変換され，これは，量子微分方程式 (5.88) の形になっている．さらに，$\Delta(\Phi(x))$ は $\{\delta_{A_j(x)}\}$ で表され，式 (5.101) は式 (5.90) の形になる．したがって，式 (5.101) を積分することにより，$\Phi(x)$ は次のように表される[3)]．

公式 5.13 条件式 (5.89) で定義される演算子 $\Phi(x)$，すなわち $\Phi(x) = \log(\mathrm{e}^{A_1(x)}\cdots \mathrm{e}^{A_r(x)})$ は，次式で表される：

$$\Phi(x) = \sum_{j=1}^{r}\int_0^x \frac{\log(\mathrm{e}^{\delta_{A_1(t)}}\cdots \mathrm{e}^{\delta_{A_r(t)}})}{\mathrm{e}^{\delta_{A_1(t)}}\cdots \mathrm{e}^{\delta_{A_r(t)}}-1}\times \mathrm{e}^{\delta_{A_1(t)}}\cdots \mathrm{e}^{\delta_{A_{j-1}(t)}}\Delta(A_j(t))\frac{dA_j(t)}{dt}dt. \qquad (5.102)$$

この公式は，まず第 1 に，背理法により証明された「$\Phi(x)$ は交換子の線形結合で表される」という BCH 定理を自動的に導いている．第 2 に，BCH 公式の一般項を与えている．特に，$A_j(t) = tA_j$ とおけば，従来の DSW 定理の活用による面倒な計算により導出した結果を具体的に再現していることがわかる（補遺参照）．すなわち，一般公式 (5.102) を，$A_j(x) = xA_j$ とおき適用して，$\Delta(tA_j)A_j = A_j$ に注意すると，次の公式が得られる[3)]．

公式 5.14 演算子 $\Phi(x) = \log(\mathrm{e}^{xA_1}\cdots \mathrm{e}^{xA_r})$ は次式で与えられる：

$$\begin{aligned}\Phi(x) &= \sum_{j=1}^{r}\int_0^x \frac{\log(\mathrm{e}^{t\delta_{A_1}}\cdots \mathrm{e}^{t\delta_{A_r}})}{\mathrm{e}^{t\delta_{A_1}}\cdots \mathrm{e}^{t\delta_{A_r}}-1}\times \mathrm{e}^{t\delta_{A_1}}\cdots \mathrm{e}^{t\delta_{A_{j-1}}}A_j dt \\ &= \sum_{j=1}^{r}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\int_0^x (1-\mathrm{e}^{tA_1}\cdots \mathrm{e}^{tA_r})^{n-1}\mathrm{e}^{tA_1}\cdots \mathrm{e}^{tA_{j-1}}A_j dt. \qquad (5.103)\end{aligned}$$

特に，$r = 2$ とおき，$A_1 = A, A_2 = B$ とすると，補遺で述べている結果が次のように得られる[3)]．

$$\begin{aligned}\log(\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{B}) &= \int_0^1 \frac{\log(\mathrm{e}^{t\delta_A}\mathrm{e}^{t\delta_B})}{\mathrm{e}^{t\delta_A}\mathrm{e}^{t\delta_B}-1}\mathrm{e}^{t\delta_A}(A+B)dt \\ &= \sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n}\int_0^1 (1-\mathrm{e}^{t\delta_A}\mathrm{e}^{t\delta_B})^{n-1}(A+\mathrm{e}^{t\delta_A}B)dt \\ &= A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]+\frac{1}{12}[B,[B,A]]+\cdots. \qquad (5.104)\end{aligned}$$

5.3.4 BCH 定理（無限次の自由リー代数による線形表現）の量子解析的証明のからくり

前項では，式の変形をいかにうまく工夫して望みの表式を導くかに頁数を費やした．ここでは，BCH 定理の本質を「Aha! そういうことか！」とわかってもらうため，その量子解析による導出法をまとめ数理的構造を浮き彫りにしよう．

$$\boxed{\frac{de^{\Phi(x)}}{dx}} = \boxed{e^{\Phi(x)}} \times \boxed{(\delta_{\Phi(x)}\text{ の関数})\cdot\frac{d\Phi(x)}{dx}}$$

$$\| \qquad\qquad \| \qquad\qquad \Updownarrow \text{式 (5.101)}$$

$$\boxed{\frac{d}{dx}\left(e^{A_1(x)}\cdots e^{A_r(x)}\right)} = \boxed{e^{A_1(x)}\cdots e^{A_r(x)}} \times \boxed{\sum_{j=1}^{r}(\{\delta_{A_k(x)}\}\text{ の関数})\cdot\frac{dA_j(x)}{dx}}$$

$$\text{キー等式}:e^{\delta_{\Phi}(x)} = e^{\delta A_1(x)}\cdots e^{\delta A_r(x)} \qquad (*)$$

図 5.1　指数演算子の量子微分方程式導出のスキーム．等式 (*) の存在（不変形式）が式 (5.101) の成立のキーポイントである．2 重線囲みの左側の内部微分の関数部分が非可換性（量子効果）を表す．

条件式 (5.89) で定義される演算子 $\Phi(x)$ の特徴とその具体的な表式を求めるための量子微分方程式 (5.101) を導く方法の要点をまとめると，図 5.1 のようになる．すなわち，条件式 (5.89) の両辺を x で微分し，量子微分の公式 (5.96) を用いて，それぞれ，もとの演算子関数と内部微分の関数部分（非可換性を表す因子）との積に分解し，共通因子を取り除くと，内部微分だけで表される量子微分方程式 (5.101) が導かれる．その際に，式 (5.89) から導かれる公式 5.12（すなわち，式 (5.92)）が本質的な役割を果たす．

条件式 (5.89) と式 (5.92) との相対関係（不変形式）がまさに指数演算子の真骨頂を表している．こうして，演算子 $\Phi(x)$ に関する量子微分方程式 (5.101) が導かれる．これを x で積分することにより，$\Phi(x)$ が内部微分 $\{\delta_{A_j(x)}\}$ の関数を演算子 $dA_j(x)/dx$ に作用させた形に表されるという望みの定理が導かれる．

5.3.5　一般化された DSW 定理[3)]

実は，上の一般的な量子解析（量子微分）の活用の過程を見ると，補遺で証明する DSW 定理 (5A.4) は，次のように，より一般的な形に拡張できることが容易にわかる[3)]．

定理 5.1（一般化された DSW 定理）　互いに非可換な演算子 $A_1,\cdots,A_r$ で作られる次の形の任意の関数 $S=\sum_k^r f_k(\{A_j\})A_k$ が $\{A_j\}$ の交換子の線形結合（自由リー代数）になるための必要十分条件は

$$S=\sum_k\int_0^1 f_k(\{t\delta_{A_j}\})A_k dt \tag{5.105}$$

である．

証明　十分条件であることは，式 (5.105) の右辺が交換子の線形結合であることから明らかである．次に必要条件について考える．$f_k(\{A_j\})$ が $(n-1)$ 次の $\{A_j\}$ の多項式の場合には，$f_k(\{A_j\})A_k$ が n 次多項式になり，DSW 定理の $P_n(\{A_j\})$ に対応する．すなわち，この場合の S を $S_n(\{A_j\})$ と書くと，

$$
\begin{aligned}
\text{式 (5.105) の右辺} &= \sum_k \int_0^1 t^{n-1} dt f_k(\{\delta_{A_j}\}) A_k \\
&= \frac{1}{n}\sum_k f_k(\{\delta_{A_j}\}) A_k = \frac{1}{n}\left\{\sum_k f_k(\{A_j\}) A_k\right\}_n \\
&= \frac{1}{n}\{S_n(\{A_j\})\}_n
\end{aligned}
\tag{5.106}
$$

となり，補遺の条件式 (5A.4) に一致する．ただし，記号 $\{\cdots\}_n$ は (5A.5) で定義されるので，式 (5.106) の最後から 2 番目の等号は定義そのものである．こうして，

$$
S_n(\{A_j\}) = \frac{1}{n}\{S_n(\{A_j\})\}_n \tag{5.107}
$$

が導かれ，n 次多項式だけの場合は，式 (5.105) が必要条件であることがわかる．一般に異なる次数の多項式の場合も式 (5.105) の t-積分により，うまく正しい因子 $\frac{1}{n}$ を与えるので，一般の $S(\{A_j\})$ に対しても

$$
S(\{A_j\}) = \int_0^1 S(\{t\delta_{A_j}\}) dt \tag{5.108}
$$

が必要条件であることがわかる．

本節では，量子微分方程式を中心テーマとして解説し，その有効性を示すため，BCH 定理を再び取り上げた．特に，具体的に解を求める一般的な定式化によっても抽象的な特徴を証明できることを例示した．次節では，多変数演算子関数の量子偏微分を定式化し，**量子偏微分方程式**を用いて，いろいろな指数積公式を導出する．

補遺：BCH 公式の従来の導出法―DSW 定理の活用

すでに第 4 章において，BCH 公式の表式とその本質について一応説明したけれども，本章では，量子解析，特に**量子微分方程式**を用いて，BCH 公式を再考した．そこで，この新しい方法が従来の導出法と比べていかに有効であるかを知るために，従来の導出法およびそれに用いられている **DSW 定理** (Dynkin–Specht–Wever Theorem)[3, 11] をここで解説する．

簡単のために，4.2 節でも導出は省略して結果の表式だけ書き下した BCH 公式 (4.28)，すなわち

$$
\log(\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B) = A + B + \frac{1}{2}[A,B] + \frac{1}{12}[A,[A,B]] + \frac{1}{12}[B,[B,A]] + \cdots \tag{5A.1}
$$

の従来の導出法[3, 11] を詳しく説明する．

冒頭でも述べた通り，従来の取扱い方では，BCH 公式の本質である "$\log(\mathrm{e}^A\mathrm{e}^B)$ が A と B の交換子の線形結合で表されるという特徴" を踏まえて，とにかく

強引に，式 (5A.1) の左辺を A と B の n 次多項式の形に展開する：

$$\log(e^A e^B) = \log[1 + (e^A e^B - 1)] = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n}(e^A e^B - 1)^n$$
$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n-1}}{n} \left[\left(1 + A + \frac{A^2}{2} + \cdots \right)\left(1 + B + \frac{B^2}{2} + \cdots \right) - 1 \right]^n$$
$$\equiv \sum_{n=1}^{\infty} L_n(A, B). \tag{5A.2}$$

ただし，

$$L_1(A, B) = A + B, \quad L_2(A, B) = \frac{1}{2}(AB - BA),$$
$$L_3(A, B) = \frac{1}{12}(A^2B + AB^2 + BA^2 + B^2A - 2ABA - 2BAB), \cdots \tag{5A.3}$$

のように，$L_n(A, B)$ は A と B の n 次多項式である．上の計算は $L_2(A, B)$ までは簡単であるが，$L_3(A, B)$ になると手計算ではあまりにも面倒になる（数式処理に頼ることになる）．しかも，$L_2(A, B)$ が交換子 $\frac{1}{2}[A, B]$ になることはすぐわかるが，$L_3(A, B)$ が 3 次の交換子の線形結合になることを確かめるのは容易ではない．次数 n が大きくなると，それはますます困難になる．これを少し解消する方法が次の DSW 定理[11)]の利用である．

定理 5.2（DSW 定理） $P_n(A, B)$ が A と B の n 次の交換子の線形結合であるための必要十分条件は

$$P_n(A, B) = \frac{1}{n}\{P_n(A, B)\}_n \tag{5A.4}$$

が成り立つことである．ただし，記号 $\{\cdots\}_n$ は次式で定義される：

$$\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n = \delta_{A_1}\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} = \delta_{A_1}\delta_{A_2}\cdots\delta_{A_{n-1}}A_n$$
$$= [A_1, [A_2, \cdots [A_{n-1}, A_n] \cdots]. \tag{5A.5}$$

また，記号 $\{\cdots\}_n$ は次のような線形性

$$\{P_n(A, B) + Q_n(A, B)\}_n = \{P_n(A, B)\}_n + \{Q_n(A, B)\}_n \tag{5A.6}$$

を持つものとする．

証明　式 (5A.4) の右辺は，交換子の線形結合であるから，条件式 (5A.4) は十分条件であることは明らかである．次に，これは必要条件であることを示そう．一般の n 次交換子はすべて，交換子 (5A.5) の線形結合で表されるので，式 (5A.4) が必要条件であることは次の公式から直ちに示される．

公式 5.15　一般の正の整数 n に対し，任意の演算子 $\{A_j\}$ に関して次式が成り立つ：

$$\{\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n\}_n = n\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n. \tag{5A.7}$$

ただし，$\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n$ は (5A.5) で定義される．また，$\{\{A\}_1\}_1 = \{A\}_1 = A$ である．

証明　数学的帰納法を用いて証明する．まず，式 (5A.7) が $n-1$ の場合に成り立つと仮定する．このとき，定義式 (5A.5) より，

$$\begin{aligned}\{\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n\}_n &= \{A_1\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1}\}_n - \{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n \\ &= \delta_{A_1}\{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1}\}_{n-1} - \{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n \\ &= (n-1)\delta_{A_1}\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} - \{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n \\ &= (n-1)\{A_1 A_2 \cdots A_n\}_n - \{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n\end{aligned} \tag{5A.8}$$

となる．次に，式 (5A.8) の第 2 項を変換する．そのためには，次の表示法に気づくことが本質的である．

表示法 5.1　任意の $\{A_j\}$ に対して次の表示ができる：

$$\{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n = [\delta_{A_2}, [\delta_{A_3}, \cdots [\delta_{A_{n-1}}, \delta_{A_n}] \cdots] A_1. \tag{5A.9}$$

上の表示に現れる超演算子 δ_A と δ_B の交換子に対するよく知られた公式

$$[\delta_A, \delta_B] = \delta_{[A,B]} \tag{5A.10}$$

をくり返し用いて，(5A.9) を変形すると，次のようになる：

$$\begin{aligned}\{\{A_2 \cdots A_n\}_{n-1} A_1\}_n &= [\delta_{A_2}, [\delta_{A_3}, \cdots [\delta_{A_{n-2}}, \delta_{[A_{n-1}, A_n]}] \cdots] A_1 \\ &= \cdots = \delta_{[A_2, [A_3, \cdots [A_{n-1}, A_n] \cdots]} A_1 \\ &= -\delta_{A_1}[A_2, [A_3, \cdots [A_{n-1}, A_n] \cdots] \\ &= -\{A_1 A_2 A_3 \cdots A_{n-1} A_n\}_n\end{aligned} \tag{5A.11}$$

この変換式を式 (5A.8) の第 2 項に代入すると，公式 5.15，すなわち式 (5A.7) が n の場合にも成り立つことがわかる．また，$n=2$ の場合には，

$$\begin{aligned}&\{\{A_1 A_2\}_2\}_2 = \{[A_1, A_2]\}_2 = \{A_1 A_2 - A_2 A_1\}_2 \\ &\quad = [A_1, A_2] - [A_2, A_1] = 2[A_1, A_2] = 2\{A_1 A_2\}_2\end{aligned} \tag{5A.12}$$

であることは直ちにわかる．こうして，数学的帰納法で公式 5.15 が証明されたことになる．

上で紹介したDSW定理を用いると，$\log(e^A e^B)$ は，(5A.2) より，原理的に交換子の線形結合で次のように表せる：

$$\log(e^A e^B) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \{L_n(A, B)\}_n. \tag{5A.13}$$

実際，例えば，

$$\{L_2(A, B)\}_2 = \frac{1}{2}(\{A, B\}_2 - \{B, A\}_2) = \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2}([A, B] - [B, A]) = \frac{1}{2}[A, B] \tag{5A.14}$$

となり，(5A.1) の 2 次の項と一致することがわかる．高次の項も同様である．これが BCH 公式の従来の面倒な導出法である．

5.4 多変数演算子関数の量子偏微分とその応用

前節までは，主として 1 変数演算子関数の量子微分とその応用について解説してきた．前節で扱った指数積の場合は，多変数ではあるが指数関数の特殊性の由に，取扱いは実質的に 1 変数の量子微分と同じであった．ここでは，一般の多変数演算子関数に対する量子偏微分を定式化する．それを用いて，量子偏微分方程式を導入し，指数積公式を再考する．さらに，くり込まれた BCH 公式についても説明する．

5.4.1 量子偏微分—多変数関数への拡張

まず，1 変数関数の量子微分の復習から始めよう[2,3]．ガトウ微分 $df(A)$ と量子微分 $df(A)/dA$ は次式で定義されるのだった[2,3]：

$$df(A) = \lim_{h \to 0} \frac{f(A + hdA) - f(A)}{h} \equiv \frac{df(A)}{dA} \cdot dA. \tag{5.109}$$

図 5.2 にまとめた通り，**量子微分** $df(A)/dA$ は互いに可換な A と**内部微分** δ_A を用いて表され，通常の数のように扱うことができるので大変便利である（ただし，内部微分 δ_A は任意の演算子 Q に対して $\delta_A Q \equiv [A, Q] \equiv AQ - QA$ で定義される）．特に，積分形は古典的な微分 $f^{(1)}(x) \equiv df(x)/dx$ との対応が明瞭であり，高階量子微分への拡張が容易な形をしている[2,3]．

同様に，**多変数関数** $f(A_1, A_2, \cdots, A_r)$ に対するガトウ微分と**量子偏微分**は次式で定義される[2)]：

$$df(\{A_k\}) = \lim_{h \to 0} \frac{f(\{A_k + hdA_k\}) - f(\{A_k\})}{h} \equiv \sum_j \frac{\partial f(\{A_k\})}{\partial A_j} dA_j. \tag{5.110}$$

演算子 $\{A_k\}$ がパラメータ x の関数のときには，上式は

量子微分 $\dfrac{df(A(x))}{dx} = \dfrac{df(A(x))}{dA(x)}\dfrac{dA(x)}{dx};\ df(A) = \dfrac{df(A)}{dA}\cdot dA,$

$$\frac{df(A)}{dA} = \frac{\delta_{f(A)}}{\delta_A} = \frac{f(A) - f(A-\delta_A)}{\delta_A} = \int_0^1 f^{(1)}(A - t\delta_A)dt$$

⇓ 多変数関数へ拡張

量子偏微分 $\dfrac{df(\{A_k(x)\})}{dx} = \displaystyle\sum_{j=1}^{r}\frac{\partial f(\{A_k(x)\})}{\partial A_j(x)}\cdot\frac{dA_j(x)}{dx}$

$$\frac{\partial}{\partial A_j}(f_1(A_1)\cdots f_j(A_j)\cdots f_r(A_r)) = f_1(A_1)\cdots f_{j-1}(A_{j-1})f_r(A_r - \delta_{A_r}) \times\cdots f_{j+1}(A_{j+1} - \delta_{A_{j+1}})\frac{d}{dA_j}f_j(A_j)$$

同じ変数が重複して現れる積の場合も同様に拡張できる．さらに一般の関数 $f(A_1, A_2, \cdots, A_r)$ の場合は，積の関数の和に分解して，上の公式を用いる．こうして，

$$df(A_1,\cdots,A_r) = \sum_{j=1}^{r}\frac{\partial f}{\partial A_j}dA_j$$

がわかる．

図 5.2 **量子微分**を量子偏微分に拡張する定式化.

$$\frac{df(\{A_k(x)\})}{dx} = \sum_j \frac{\partial f(\{A_k(x)\})}{\partial A_j(x)}\cdot\frac{dA_j(x)}{dx} \tag{5.111}$$

と書ける[2]．ここで，量子偏微分 $\partial f/\partial A_j$ の具体的な表式は，図 5.2 に示す通り，1 変数の場合に比べて，かなり複雑になる．その理由は A_k と内部微分 δ_{A_j} が $j \neq k$ のとき互いに非可換なことである．このことに注意しながら，量子偏微分の具体的な表式を導出することにしよう．

微分は線形の操作であるから，扱い易い関数形をベースにして，一般の多変数関数をそれらの線形結合（和）で表し**量子偏微分**を施すことにする．まず，積の関数の微分を考える：

$$\frac{d}{dx}\big(f_1(A_1(x))\cdots f_r(A_r(x))\big)$$
$$= \sum_j f_1(A_1(x))\cdots f_{j-1}(A_{j-1}(x))\frac{df_j(A_j(x))}{dx}f_{j+1}(A_{j+1}(x))\cdots f_r(A_r(x)). \tag{5.112}$$

量子偏微分の表式を求めるには，上式の右辺の途中にある微分式 $df_j(A_j(x))/dx$ を一番右側に移動させる必要がある．しかし，その中にある $A_j(x)$ や内部微分 $\delta_{A_j(x)}$ は他の $A_k(x)$ や $\delta_{A_k(x)}$ $(k \neq j)$ と非可換であるから，次のような工夫をして，これを実行しよう．

まず，1 変数のときには，次の公式が成り立つことに注意する[2]．

公式 5.16 任意の演算子関数 $f(A)$ と任意の演算子 Q に対して次式が成り立つ：

$$Qf(A) = f(A - \delta_A)Q. \tag{5.113}$$

これを一般の n 個の積の関数 $f_1(A_1)\cdots f_n(A_n)$ に拡張しよう．その際に注意すべきことは，「**超演算子**」である**内部微分** $\delta_{A_1},\cdots,\delta_{A_n}$ は右側にある全体の演算子に作用し，それとの交換子を作るということである．ここが量子解析を正しく実行するための急所の一つである．まず，公式 5.16 を 1 回用いると，

$$Qf_1(A_1)f_2(A_2)\cdots f_n(A_n) = (f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q)f_2(A_2)\cdots f_n(A_n) \tag{5.114}$$

となる．ここで，再び公式 5.16 を用いて Q を右側に移したい（ここで迂闊に式 (5.114) の右辺の $(f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q)$ の外側のカッコを忘れて，Q と f_2 との積とみなして公式 5.16 を適用すると，とんでもない間違いとなる）．これに留意して，1 つのまとまった演算子である "$(f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q)$" 全体を公式 5.16 の Q とみなして，$f_2(A_2)$ の右側に次のように移動させる：

$$\big(f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q\big)f_2(A_2) = f_2(A_2 - \delta_{A_2})f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q. \tag{5.115}$$

この操作を順次くり返して Q が一番右側に来るようにすると，次の公式が得られる．

公式 5.17　演算子 $A_1,\cdots,A_n$ の任意の演算子関数列 $\{f_j(A_j)\}$ の積 $f_1(A_1)\cdots f_n(A_n)$ と任意の演算子 Q に対して，次式が成り立つ：

$$\begin{aligned} &Qf_1(A_1)f_2(A_2)\cdots f_n(A_n) \\ &= f_n(A_n - \delta_{A_n})f_{n-1}(A_{n-1} - \delta_{A_{n-1}})\cdots f_2(A_2 - \delta_{A_2})f_1(A_1 - \delta_{A_1})Q. \end{aligned} \tag{5.116}$$

この大変便利な公式を用いて式 (5.112) を変形し，さらに公式

$$\frac{df(A(x))}{dx} = \frac{df(A(x))}{dA(x)} \cdot \frac{dA(x)}{dx} \tag{5.117}$$

を考慮すると積の関数の偏微分の表式が図 5.2 の中にあるような形に求まる．すなわち，次の公式が得られる．

公式 5.18　任意の演算子関数列 $\{f_j(A_j)\}$ に対して，その積の**量子偏微分**は次式で与えられる：

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial A_j}(f_1(A_1)\cdots f_r(A_r)) \\ &= f_1(A_1)\cdots f_{j-1}(A_{j-1})f_r(A_r - \delta_{A_r})\cdots f_{j+1}(A_{j+1} - \delta_{A_{j+1}})\frac{d}{dA_j}f_j(A_j). \end{aligned} \tag{5.118}$$

より一般の演算子関数 $f(A_1, A_2, \cdots, A_r)$ の量子偏微分はその関数を上の積

の関数の和に分解して，公式 5.18 を用いればよい．また，同じ変数がとびとびに積の中に現れる場合にも，公式 5.17，したがって公式 5.18 を拡張するのは容易である．

5.4.2　指数演算子に関する量子偏微分の分離積公式の再考

前項の量子偏微分の公式 5.18 は極めて一般的である．そこで，前節で議論した指数演算子の場合に公式 5.18 を適用してみると，前節で求めたような美しい形（$\{A_j\}$ と $\{\delta_{A_j}\}$ の関数の積に分離すること）にはならない．それは，一般の量子偏微分の公式 5.18 の定式化では，公式の適用範囲を広げるため，$\{A_j\}$ と $\{\delta_{A_j}\}$ が互いに入り混じった形で満足したからである．

それに対して，$f(x) = \mathrm{e}^x$（指数関数）の場合は

$$f(A - \delta_A) = \mathrm{e}^A \mathrm{e}^{-\delta_A} \tag{5.119}$$

のように A の部分と δ_A の関数が積に分離する．量子偏微分の場合にも，式 (5.114) まで変換したとき，$f_1(A_1 - \delta_{A_1})$ を e^{A_1} と $\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}$ の積に分離し，e^{A_1} はそのままにして，$\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}Q$ のみ $f_2(A_2) = \mathrm{e}^{A_2}$ の右側に移す：

$$\begin{aligned} Qf_1(A_1)f_2(A_2) &= \mathrm{e}^{A_1}(\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}Q)f_2(A_2) = \mathrm{e}^{A_1}f_2(A_2 - \delta_{A_2})(\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}Q) \\ &= \mathrm{e}^{A_1}\mathrm{e}^{A_2}(\mathrm{e}^{-\delta_{A_2}}\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}Q). \end{aligned} \tag{5.120}$$

この手順をくり返すと，前節で求めた公式（分離形）に達する：

$$Q\mathrm{e}^{A_1}\cdots\mathrm{e}^{A_n} = (\mathrm{e}^{A_1}\cdots\mathrm{e}^{A_n})(\mathrm{e}^{-\delta_{A_n}}\cdots\mathrm{e}^{-\delta_{A_1}}Q) \tag{5.121}$$

（この公式は公式 $\mathrm{e}^{-\delta_A}Q = \mathrm{e}^{-A}Q\mathrm{e}^{A}$ を用いて直接変形したほうが手取り早い）．こうして，指数演算子の積の**量子微分方程式**は積分し易い形になる（式 (5.90) 参照）[2,3]．

5.4.3　量子全微分，全微分方程式およびその量子解

通常の多変数関数 $f(x_1, \cdots, x_n)$ の全微分 df は

$$df = \frac{\partial f}{\partial x_1}dx_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial x_n}dx_n \equiv f_1 dx_1 + \cdots + f_n dx_n \tag{5.122}$$

によって定義される．このとき，次のコーシー・リーマンの条件式が成り立つ[2]：

$$\frac{\partial f_j}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}\frac{\partial}{\partial x_j}f = \frac{\partial}{\partial x_j}\frac{\partial}{\partial x_k}f = \frac{\partial f_k}{\partial x_j}. \tag{5.123}$$

この条件は $\partial f_j/\partial x_k$ と $\partial f_k/\partial x_j$ が共に連続であれば成り立つ．これは，逆に，式 (5.122) の最右辺 $f_1 dx_1 + \cdots + f_n dx_n$ が全微分 df になるための必要十分条件である．

この理論は**多変数演算子関数**にも拡張できる．今，演算子 $A_1, \cdots, A_n$ がそ

れぞれパラメータ $t_1, \cdots, t_n$ の関数であるとする：

$$A_1 = A_1(t_1), \cdots, A_n = A_n(t_n). \tag{5.124}$$

このとき，多変数演算子関数 $f = f(A_1(t_1), A_2(t_2), \cdots, A_n(t_n))$ の量子全微分 df は

$$\begin{aligned} df &= \frac{\partial f}{\partial t_1} dt_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial t_n} dt_n \\ &= \frac{\partial f}{\partial A_1(t_1)} \frac{dA_1(t_1)}{dt_1} dt_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial A_n(t_n)} \frac{dA_n(t_n)}{dt_n} dt_n \\ &\equiv f_1 dA_1 + \cdots + f_n dA_n \end{aligned} \tag{5.125}$$

と表せる．ただし，

$$f_j = \frac{\partial f}{\partial A_j} \quad \text{および} \quad dA_j = \frac{dA_j(t_j)}{dt_j} dt_j \tag{5.126}$$

である．

さて，通常の関数の場合と同様に，多変数演算子関数 $\{g_k(\{A_j(t_j)\}); k = 1, 2, \cdots, n\}$ が与えられたとき，量子微分方程式

$$g_1 dt_1 + \cdots + g_n dt_n = 0 \tag{5.127}$$

を考える．この**量子微分方程式**が**量子全微分方程式**になるとは限らない．そこで，**量子積分因子** $h(\{A_j(t_j)\})$ をかけて

$$df = h(g_1 dt_1 + \cdots + g_n dt_n) \tag{5.128}$$

のような量子全微分 df を作ることを考える．この df が存在するための条件は，明らかに，

$$\frac{\partial}{\partial t_j}(hg_k) = \frac{\partial}{\partial t_k}(hg_j) \tag{5.129}$$

である．この条件の下で量子積分因子 h を求め，もとの $\{g_k\}$ に h をかけた $\{hg_k\}$ を改めて $\{g_k\}$ とおいて，量子全微分方程式

$$df = g_1 dt_1 + \cdots + g_n dt_n = 0 \tag{5.130}$$

を考える．この解は，通常の関数の場合と形式的には同じになり，

$$f = c \quad （定数演算子） \tag{5.131}$$

で与えられる．ただし，量子積分関数 f は，$\{t_k\}$ の初期値を $\{t_k^0\}$ とおいて，

$$f = \sum_{k=1}^{n} \int_{t_k^0}^{t_k} g_k(A_1(t_1), \cdots, A_k(t_k'), A_{k+1}(t_{k+1}^0), \cdots, A_n(t_n^0)) dt_k' \tag{5.132}$$

で与えられる[2]．**積分条件式**

$$\frac{\partial}{\partial t_j}g_k = \frac{\partial}{\partial t_k}g_j \tag{5.133}$$

を用いて，式 (5.130) の第 1 等号が成り立つことが一般的に証明できる．ここでは，簡単のために，$n=2$ の場合に，量子全微分方程式

$$df = gds + hdt \tag{5.134}$$

を扱うことにする．パラメータ依存性を明示して，$g = g(s,t), h = h(s,t)$ と書くと，積分 f は

$$f = \int_{s_0}^{s} g(s', t_0)ds' + \int_{t_0}^{t} h(s,t')dt' \tag{5.135}$$

と書ける．この s と t の偏微分をとると，

$$\frac{\partial f}{\partial s} = g(s,t_0) + \int_{t_0}^{t} \frac{\partial}{\partial s}h(s,t')dt' \tag{5.136}$$

となり，積分条件式 (5.133) を用いて上式右辺の第 2 項を積分すると，

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial s} &= g(s,t_0) + \int_{t_0}^{t} \frac{\partial}{\partial t'}g(s,t')dt' \\ &= g(s,t_0) + g(s,t) - g(s,t_0) = g(s,t)\end{aligned} \tag{5.137}$$

となる．同様に，

$$\frac{\partial f}{\partial t} = h(s,t) \tag{5.138}$$

となる．したがって，式 (5.135) で与えられる関数 f は，式 (5.134) の積分になっている．一般の n の場合も同様にして，

$$\frac{\partial f}{\partial t_k} = g_k(A_1(t_1), \cdots, A_n(t_n)) \tag{5.139}$$

が示せる．したがって，式 (5.134) で与えられる f は量子全微分方程式 (5.130) の**量子積分関数**になっていることが証明される[2]．

5.4.4　多変数演算子関数の量子テイラー展開[2]

互いに非可換な演算子 $\{A_k\}$ と $\{B_k\}$ の関数 $f(\{A_k + x_k B_k\})$ の $\{x_k\}$ に関するテイラー展開は，形式的には通常の関数と同様に，

$$f(\{A_k + x_k B_k\}) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{x_1^{m_1}\cdots x_n^{m_n}}{m_1!\cdots m_n!}\left(\frac{\partial^m f(\{A_k + x_k B_k\})}{\partial x_1^{m_1}\cdots \partial x_n^{m_n}}\right)_{\{x_k=0\}} \tag{5.140}$$

と表せる．ただし，整数の組 $\{m_k\}$ は $m_1 + \cdots + m_n = m$ をみたす．1 変数の場合と違い，式 (5.140) の展開係数は一般に複雑過ぎてあまり実用的ではな

い[2)]ので，ここではこれ以上深入りしないことにする．

5.4.5 くり込まれた BCH 公式

応用上は，2 つの指数演算子 e^A と e^B の積を 1 つの指数演算子 e^Φ の形にまとめるとき一方の演算子 A は Φ に無限次まで取り込む（くり込む）ことが必要になる場合がある[3)]．すなわち，

$$\mathrm{e}^A\mathrm{e}^{\varepsilon B} = \mathrm{e}^{\Phi(\varepsilon)} \tag{5.141}$$

とおいて，$\Phi(\varepsilon)$ を ε のべきで展開する：

$$\Phi(\varepsilon) = A + R(\varepsilon);\ R(\varepsilon) = \varepsilon R_1 + \varepsilon^2 R_2 + \cdots. \tag{5.142}$$

演算子 $R(\varepsilon)$ を求めるために，$R(\varepsilon)$ に関する微分方程式を作る．そのために，式 (5.141) の両辺を ε で微分する．関係式 $\Phi(\varepsilon) = A + R(\varepsilon)$ を用いると，

$$\mathrm{e}^{\Phi(\varepsilon)}\Delta(-\Phi(\varepsilon))\frac{dR(\varepsilon)}{d\varepsilon} = \mathrm{e}^A\mathrm{e}^{\varepsilon B}B = \mathrm{e}^{\Phi(\varepsilon)}B \tag{5.143}$$

が得られる[3)]．ただし，$\Delta(A)$ は

$$\Delta(A) = \frac{\mathrm{e}^{\delta_A} - 1}{\delta_A} \tag{5.144}$$

で定義される[2)]．また，次の公式[2)]を用いた：

$$\frac{d\mathrm{e}^\Phi}{d\Phi} = \mathrm{e}^\Phi\Delta(-\Phi) = \mathrm{e}^\Phi\mathrm{e}^{-\delta_\Phi}\Delta(\Phi). \tag{5.145}$$

こうして，$R(\varepsilon)$ に関する量子微分方程式

$$\frac{d}{d\varepsilon}R(\varepsilon) = \frac{\delta_{\Phi(\varepsilon)}}{\exp(\delta_{\Phi(\varepsilon)}) - 1}\mathrm{e}^{\delta_{\Phi(\varepsilon)}}B = \frac{\log(\mathrm{e}^{\delta_A}\mathrm{e}^{\varepsilon\delta_B})}{\mathrm{e}^{\delta_A}\mathrm{e}^{\varepsilon\delta_B} - 1}\mathrm{e}^{\delta_A}B \tag{5.146}$$

が得られる[2,3)]．ここで式 (5.141) から導かれる次の関係式を用いた：

$$\mathrm{e}^{\delta_{\Phi(\varepsilon)}} = \mathrm{e}^{\delta_A}\mathrm{e}^{\varepsilon\delta_B};\quad \mathrm{e}^{\delta_A}Q = \mathrm{e}^AQ\mathrm{e}^{-A}, \tag{5.147}$$

および $\exp(\varepsilon\delta_B)B = B$．微分方程式 (5.146) を積分すると，初期条件 $R(0) = 0$ を用いて，

$$R(\varepsilon) = \int_0^\varepsilon \frac{\log(\mathrm{e}^{\delta_A}\mathrm{e}^{t\delta_B})}{\mathrm{e}^{\delta_A}\mathrm{e}^{t\delta_B} - 1}dt\mathrm{e}^{\delta_A}B \tag{5.148}$$

となる[2,3)]．特に，$R(\varepsilon)$ の 1 次の項 R_1 は

$$R_1 = \frac{\delta_A}{1 - \mathrm{e}^{-\delta_A}}B = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(-1)^n}{n!}B_n\delta_A^nB \tag{5.149}$$

と与えられる[2,3)]．ただし，$\{B_n\}$ は次のようなベルヌーイ数である：

$$B_0=1,\ B_1=-\frac{1}{2},\ B_2=\frac{1}{6},\ B_4=-\frac{1}{30},\ B_6=\frac{1}{42},\ B_8=-\frac{1}{30},\ B_{10}=\frac{5}{66},$$
$$B_{12}=-\frac{691}{2730},\ B_{14}=\frac{7}{6},\ B_{16}=-\frac{3617}{510},\cdots;B_{2n+1}=0\quad(n\geq 1). \tag{5.150}$$

このように，くり込まれたBCH公式にベルヌーイ数が現れるのは，指数演算子の量子微分 (5.145) に非可換性を表す因子 (5.144) がつくからであり，数学の奥深さを感じさせる．**内部微分** δ_A に関する関係式

$$\delta_A^n\cdot B=\underbrace{[A,[A,\cdots[A}_{n},B]\cdots] \tag{5.151}$$

を用いると，より具体的に R_1 は次のような交換子の線形結合で表される[3,12]：

$$R_1=B+\frac{1}{2}[A,B]+\frac{1}{12}[A,[A,B]]+\cdots. \tag{5.152}$$

式 (5.149) からもわかるように，演算子 A の効果は無限次まで正確に取り込まれている．

さらに，$R(\varepsilon)$ の高次まで具体的に計算するには，第2節で説明したレゾルベント展開 (5.69) や**対数演算子関数** $\log(A+xB)$ の量子テイラー展開 (5.85) が役立つ．すなわち，

$$L_0=\mathrm{e}^{\delta_A},\quad L_\varepsilon=\mathrm{e}^{\delta_A}(\mathrm{e}^{\varepsilon\delta_B}-1) \tag{5.153}$$

とおいて，$R(\varepsilon)$ は

$$\begin{aligned}R(\varepsilon)&=\int_0^\varepsilon dt\frac{\log(L_0+L_t)}{(L_0-1)+L_t}L_0B\\&=\int_0^\varepsilon dt\int_0^\infty ds\left(\frac{1}{s+1}-\frac{1}{s+L_0+L_t}\right)\\&\qquad\times\sum_{n=0}^\infty\frac{1}{L_0-1}\left(-L_t\frac{1}{L_0-1}\right)^nL_0B\\&=\int_0^\varepsilon dt\left(\log L_0-\sum_{n=1}^\infty\int_0^\infty ds\frac{1}{L_0+s}\left(-L_t\frac{1}{L_0+s}\right)^n\right)\\&\qquad\times\sum_{n=0}^\infty\frac{1}{L_0-1}\left(-L_t\frac{1}{L_0-1}\right)^nL_0B\end{aligned} \tag{5.154}$$

と表され，具体的な計算手順が示される．例えば，$R(\varepsilon)$ の2次の項 R_2 は，

$$R_2=-\frac{1}{2}\left(\frac{\delta_A}{\mathrm{e}^{\delta_A}-1}\mathrm{e}^{\delta_A}\delta_B-\int_0^\infty\frac{1}{\mathrm{e}^{\delta_A}+s}\mathrm{e}^{\delta_A}\delta_B\frac{1}{\mathrm{e}^{\delta_A}+s}ds\right)\frac{\mathrm{e}^{\delta_A}}{\mathrm{e}^{\delta_A}-1}B \tag{5.155}$$

と求まる．

このように，くり込まれたBCH公式の定式化では，対数演算子関数などの

量子テイラー展開公式が有効に利用されることがわかり，大変興味深い．

本節では，多変数演算子の関数について，量子偏微分を導入し，量子偏微分方程式，特に量子全微分方程式の定式化を行い，その解について説明した．また，くり込まれたBCH公式についても詳しく説明し，量子テイラー展開の有効性を示した．次節では，さらに量子汎関数微分とその物理への応用などについて説明する．

5.5 量子汎関数微分と順序づき指数演算子

自然現象を統一的に扱う方法として変分原理[5]に基づく理論的処法がある．これは，物体の軌道のような系の全体の変化で決まる量，すなわち作用を最小にする原理である．この作用のように，関数（やその微分を含む関数）の積分などで与えられる量を「**汎関数**」という．したがって，その微分，すなわち「汎関数微分（変分）」もまた，もとの関数やその微分の汎関数となる．

演算子の関数からなる汎関数を「**量子汎関数**」と呼ぶことにする．その汎関数微分（変分）を「**量子汎関数微分**（変分）」と呼ぶ．

そこで，今までの量子微分の方法[1~5]を汎関数に拡張する．まず，古典的な汎関数微分の復習をする．それを拡張して量子汎関数微分（変分）を導入する[13]．物理でよく現れる「**順序づき指数演算子**」[14]を詳しく説明し，その量子汎関数微分（変分）を解説する．さらに，**量子汎関数のテイラー展開**を導入し，順序づき指数演算子の対数，すなわち，「**エントロピー演算子**」の求め方[4]にふれる．この対数演算子は，もとの演算子の交換子の線形結合で表される．これは，指数演算子積に関するBCH公式（定理）の拡張になっている．

5.5.1 汎関数微分（変分）

関数 $A(t)$ の汎関数 $F[A(t)]$ に対して，次式により汎関数微分（変分）$\delta F[A(t)]$ を定義する[3]：

$$\delta F[A(t)] = \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{F[A(t)+\varepsilon\delta A(t)]-F[A(t)]}{\varepsilon}. \tag{5.156}$$

したがって，微分（変分）$\delta F[A(t)]$ は，関数 $A(t)$ だけでなく，微分関数 $\delta A(t)$ の汎関数となる．この定義は，$A(t)$ が通常の関数に対する，古典的な汎関数だけでなく，$A(t)$ が演算子の場合でも全く同様に適用できる．その場合には $A(t)$ が $\delta A(t)$ と非可換になるので，あえて**量子汎関数微分**（**変分**）と呼ぶことがある．その際に，汎関数そのもの（およびその変分）が演算子になる場合と，トレースなどをとることにより，c-数（通常の数）となる場合がある．ここでは，特に断らない限り，前者の場合を扱うことにする．後者の場合は，前者の場合の理論から容易に導ける．上の式 (5.156) は，わかり易く書けば，次のような展開形で捉えることができる：

$$F[A(t)+\varepsilon\delta A(t)] = F[A(t)] + \varepsilon\delta F[A(t)] + \mathrm{O}(\varepsilon^2). \tag{5.157}$$

例えば，$F[A(t)]$ が $A(t)$ とパラメータ t の関数 $\varphi(A(t),t)$ の t に関する積分

$$F[A(t)] = \int_{t_0}^{t_1} \varphi(A(t),t)dt \tag{5.158}$$

の場合には，次の公式が容易に導ける．

公式 5.19（1 次の量子汎関数微分） 汎関数 $F[A(t)]$ が式 (5.158) の形で与えられる場合の（量子）汎関数微分は次式で与えられる：

$$\delta F[A(t)] = \int_{t_0}^{t_1} \frac{d\varphi(A(t),t))}{dA(t)}\delta A(t)dt. \tag{5.159}$$

ただし，$A(t)$ が演算子の場合は，$d\varphi(A(t),t)/dA(t)$ は，量子微分[2)]を表す．$A(t)$ が古典的な通常の関数の場合は，通常の微分 $\varphi_x(x,t)$ に帰着する．

5.5.2 汎関数微分のライプニッツ規則

今までの量子微分と同様に，量子汎関数微分に対しても，次のように，任意の 2 つの汎関数 $F[A(t)]$ と $G[B(t)]$ の積に対して，次の規則が成り立つ：

$$\delta(F[A(t)]\cdot G[B(t)]) = (\delta F[A(t)])\cdot G[B(t)] + F[A(t)]\delta G[B(t)]. \tag{5.160}$$

この規則は一般的過ぎて，今までの量子微分の場合のように，この規則から代数的に直接汎関数微分の表式は求まりそうにないので，ここではこれ以上深入りしないことにする．

5.5.3 量子汎関数テイラー展開

物理現象を非線形効果まで考慮して扱う場合には，1 次微分の式 (5.157) を次のように高次まで展開する必要がある．すなわち，**高次汎関数微分** $\delta^n F[A(t)]$ を次式で定義する：

$$F[A(t)+x\delta A(t)] = F[A(t)] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!}\delta^n F[A(t)]. \tag{5.161}$$

例えば，$F[A(t)]$ が $A(t)$ の関数 $\varphi(A(t))$ の t に関する積分

$$F[A(t)] = \int_{t_0}^{t_1} \varphi(A(t))dt \tag{5.162}$$

で与えられる場合には，次の公式が導かれる．

公式 5.20（量子汎関数テイラー展開） 量子汎関数 $F[A(t)]$ が式 (5.162) で与えられる場合の（量子）汎関数テイラー展開は次式で与えられる：

$$F[A(t)+xB(t)] = F[A(t)] + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n!} \int_{t_0}^{t_1} \frac{d^n\varphi(A(t))}{dA(t)^n} B^n(t)dt$$

$$= F[A(t)] + \sum_{n=1}^{\infty} x^n \int_{t_0}^{t_1} dt \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n$$
$$\times \varphi^{(n)}(A(t) - t_1\delta_1 - \cdots - t_n\delta_n)B^n(t). \quad (5.163)$$

ただし，$\varphi^{(n)}(x)$ は通常の n 次微分を表し，$\{\delta_j\}$ は

$$\delta_j B^n(t) = B^{j-1}(t)(\delta_{A(t)}B(t))B^{n-j}(t) \quad (5.164)$$

で定義される「**超演算子**」である[1~4].

これは要するに，演算子関数 $\varphi(A(t) + xB(t))$ のテイラー展開[1~4] を行ったことに過ぎない．一般の汎関数 $F[A(t)]$ に対して，式 (5.164) のような具体的なテイラー展開の一般項の表式を与えるのは困難なので，ここではこれ以上深入りしないことにする．

5.5.4 順序づき指数演算子とその汎関数微分

前項では，汎関数の簡単な例として，式 (5.162) の形を取りあげ，その汎関数テイラー展開を説明した．それを少し拡張して，適当な関数 $\psi(x)$ に対して，次の形の汎関数

$$F[A(t)] = \psi\left(\int_{t_0}^{t_1} \varphi(A(t))dt\right) \quad (5.165)$$

を考えよう．このテイラー展開も一般には複雑である．理論科学でよく使われるのは，$\psi(x) = \mathrm{e}^x$ という指数関数の場合の汎関数である．

通常の指数関数 $x(t) = \mathrm{e}^{at}$ は関数方程式 $x(t+s) = x(t)x(s)$ で特徴づけられるので，次の微分方程式をみたす：

$$\frac{dx(t)}{dt} = \lim_{h\to 0} \frac{x(t+h) - x(t)}{h} = x(t) \lim_{h\to 0} \frac{x(h) - x(0)}{h} = x'(0)x(t) \equiv ax(t). \quad (5.166)$$

さらに，この線形微分方程式の係数 a がパラメータ t の関数の場合，すなわち，線形微分方程式

$$\frac{dx(t)}{dt} = a(t)x(t) \quad (5.167)$$

の解は，初期条件を $x(0) = 1$ として

$$x(t) = \exp\left(\int_0^t a(s)ds\right) \equiv x[a(s)] \quad (5.168)$$

で与えられることは，式 (5.168) を t で微分することによって容易に確かめられる．もちろん，指数関数の特徴を反映して，指数汎関数 $x[a(s)]$ に対しても，次の関係式が成り立つ：

$$x[a(s) + b(s)] = x[a(s)]x[b(s)]. \quad (5.169)$$

この古典的な指数汎関数のテイラー展開は容易に求められる．

さて，ここで扱いたいのは，$A(t)$ と $A(s)$ $(s \neq t)$ が互いに非可換な演算子に対する線形微分方程式

$$\frac{dX(t)}{dt} = A(t)X(t);\ X(0) = 1\ (\text{単位演算子}) \tag{5.170}$$

である．この解は次の無限積分級数で与えられる[13]：

$$\begin{aligned} X(t) &= 1 + \int_0^t A(t_1)dt_1 + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 A(t_1)A(t_2) + \cdots \\ &\quad + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n A(t_1)A(t_2)\cdots A(t_n) + \cdots . \end{aligned} \tag{5.171}$$

演算子 $\{A(t)\}$ が互いに可換な場合には通常の指数積分 (5.168) の形になるので，一般の非可換の場合には式 (5.171) を

$$X(t) = \exp_+ \left(\int_0^t A(s)ds \right) \tag{5.172}$$

と書き，これを**順序づき指数演算子**と呼ぶ[1,14]．

この演算子の逆演算子 $X^{-1}(t)$ は

$$\begin{aligned} X^{-1}(t) &= \exp_- \left(- \int_0^t A(s)ds \right) \\ &= 1 - \int_0^t A(t_1)dt_1 + \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 A(t_2)A(t_1) + \cdots \\ &\quad +(-1)^n \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{n-1}} dt_n A(t_n)\cdots A(t_2)A(t_1) + \cdots \end{aligned} \tag{5.173}$$

で与えられることが直接確かめられる．すなわち，次式が成り立つ：

$$X(t)X^{-1}(t) = X^{-1}(t)X(t) = 1. \tag{5.174}$$

指数演算子の記号 “exp” に $+, -$ の添字をつけるのは，演算子 $\{A(t)\}$ の並び方の向きを指定するためである．パラメータ t の区間 $[t_0, t_1]$ を明示して

$$U(t_1, t_0) = \exp_+ \left(\int_{t_0}^{t_1} A(s)ds \right) \tag{5.175}$$

のように書くと，次の積公式が成り立つ．

公式 5.21　順序づき指数演算子 $U(t_1, t_0)$ は次の積公式をみたす：

$$U(t_1, t_0) = U(t_1, t)U(t, t_0) \tag{5.176}$$

物理的には，$U(t_1, t_0)$ は**時間発展演算子**になっている．したがって，式 (5.176) は体系が時刻 t_0 から t まで作用 $A(s)$ によって発展し，さらに t から t_1 まで発

展するというごく自然な式を表している．

この公式5.21を用いて，順序づき指数演算子(5.172)の量子汎関数微分の公式を求めることにする．そのために，無限小演算子 $\delta A(t)$ を導入して，量子汎関数微分の定義式(5.156)より，**量子汎関数微分** $\delta U(t_1,t_0)$ を求めると，

$$\begin{aligned}\delta U(t_1,t_0) &= \lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\varepsilon}\left(\exp_+\left(\int_{t_0}^{t_1}(A(s)+\varepsilon\delta A(s))ds\right)-\exp\left(\int_{t_0}^{t_1}A(s)ds\right)\right)\\ &= \int_{t_0}^{t_1}\exp_+\left(\int_t^{t_1}A(s)ds\right)\delta A(t)\exp_+\left(\int_{t_0}^{t}A(s)ds\right)dt \quad (5.177)\end{aligned}$$

となる．ここで，次の公式を用いた[3)]．

公式 5.22 パラメータ ξ を含む演算子 $\mathscr{H}(t;\xi)$（例えば，$\mathscr{H}(t;\xi)=A(t)+\xi B(t)$ など）の順序づき指数演算子に対して次の式が成り立つ[3)]：

$$\frac{d}{d\xi}\exp_+\left(\int_{t_0}^{t}\mathscr{H}(s;\xi)ds\right)\equiv\frac{d}{d\xi}U(t;\xi)$$
$$=\int_{t_0}^{t}ds\left(\exp_+\left(\int_s^t\mathscr{H}(s';\xi)ds'\right)\frac{\partial\mathscr{H}(s;\xi)}{\partial\xi}\exp_+\left(\int_{t_0}^{s}\mathscr{H}(s';\xi)ds'\right)\right). \quad (5.178)$$

この公式は，次のようにして簡単に証明できる[3)]．まず，$U(t;\xi)$ の t に関する微分の公式

$$\frac{d}{dt}U(t;\xi)=\mathscr{H}(t;\xi)U(t;\xi),$$

および

$$\frac{d}{dt}U^{-1}(t;\xi)=-U^{-1}(t;\xi)\mathscr{H}(t;\xi) \quad (5.179)$$

を用いると，容易に次式が示せる：

$$\frac{d}{dt}\left(U^{-1}(t;\xi)\frac{\partial U(t;\xi)}{\partial\xi}\right)=U^{-1}(t;\xi)\frac{\partial\mathscr{H}(t;\xi)}{\partial\xi}U(t;\xi). \quad (5.180)$$

この式の両辺を t_0 から t まで積分した恒等式の両辺に $U(t;\xi)$ を左側からかけることにより，式(5.178)が導かれる．

順序づき指数演算子のパラメータ ξ に関する微分公式5.22は，次の通常の**指数演算子関数**の微分公式[1)]

$$\begin{aligned}\frac{d}{dx}e^{\beta A(x)} &= \int_0^\beta e^{(\beta-\lambda)A(x)}A'(x)e^{\lambda A(x)}d\lambda\\ &= \int_0^\beta e^{\lambda A(x)}A'(x)e^{(\beta-\lambda)A(x)}d\lambda, \quad (5.181)\end{aligned}$$

特に

$$\frac{d}{dx}e^{A+xB}=\int_0^1 e^{(1-\lambda)(A+xB)}Be^{\lambda(A+xB)}d\lambda$$

$$= \int_0^1 e^{\lambda(A+xB)} B e^{(1-\lambda)(A+xB)} d\lambda \tag{5.182}$$

の拡張になっている．

量子汎関数微分の式 (5.177) は，微小演算子 $\delta A(t)$ が中間に入っているので，これを右側に移して

$$\delta U(t_1, t_0) = \int_{t_0}^{t_1} D_t U(t_1, t_0) \delta A(t) dt \tag{5.183}$$

の形に変換し，"**超演算子汎関数微分**" $D_t U(t_1, t_0)$ を定義する．次に，これをあらわな形に求めることにする．そのために有効なものが次の公式である．

公式 5.23　任意の演算子 Q に対して次の順序づき指数演算子に関する等式が成り立つ：

$$\exp_-\left(-\int_{t_0}^t A(s)ds\right) Q \exp_+\left(\int_{t_0}^t A(s)ds\right) = \exp_-\left(-\int_{t_0}^t \delta_{A(s)} ds\right) Q. \tag{5.184}$$

これを証明するには，式 (5.184) の左辺を $f(t)$，右辺を $g(t)$ とおき，0 およびすべての正の整数 n に対して $f^{(n)}(0) = g^{(n)}(0)$ を示せばよい．これらの等式は，式 (5.184) の両辺を t で順次微分することにより容易に示せる．

公式 5.21 と公式 5.23 を用いると式 (5.177) より，$U(t_1, t_0)$ の超演算子汎関数微分は次の公式で与えられることがわかる[3)]．

公式 5.24　順序づき指数演算子の超演算子汎関数微分は次の式で与えられる：

$$\begin{aligned} D_t U(t_1, t_0) &= D_t \exp_+\left(\int_{t_0}^{t_1} A(s)ds\right) \\ &= \exp_+\left(\int_{t_0}^{t_1} A(s)ds\right) \exp_-\left(-\int_{t_0}^{t} \delta_{A(s)} ds\right). \end{aligned} \tag{5.185}$$

5.5.5　順序づき指数演算子の対数

物理の問題では，エントロピーのように，対数関数が重要な役割を果たすことが多い[1,5)]．そこで，ここでは，

$$\exp_+\left(\int_{t_0}^t A(s)ds\right) = e^{\Phi(t)}, \tag{5.186}$$

すなわち，

$$\Phi(t) = \log \exp_+\left(\int_{t_0}^t A(s)ds\right) \tag{5.187}$$

を量子解析により具体的に求めてみよう．

通常の指数関数は対数をとると，もとに戻り，2 つの関数は互いに逆の関係にあるが，順序づき指数関数の場合は事情は複雑になる．初等的にこれをテイ

ラー展開しようとすると極めて面倒である．ここでは，量子解析すなわち量子微分法を用いて，対数関数 $\Phi(t)$ の一般表式を求める．

さて，式 (5.186) の両辺を t で微分すると，

$$A(t)\exp_+\left(\int_{t_0}^{t} A(s)ds\right) = \mathrm{e}^{\Phi(t)}\Delta(-\Phi(t))\frac{d\Phi(t)}{dt} \tag{5.188}$$

となる．ただし，量子微分の公式[1,2]

$$\frac{d\mathrm{e}^{\Phi(t)}}{d\Phi(t)} = \mathrm{e}^{\Phi(t)}\Delta(-\Phi(t)) = \mathrm{e}^{\Phi(t)-\delta_{\Phi(t)}}\Delta(\Phi(t)), \tag{5.189}$$

および

$$\Delta(A) = \frac{\mathrm{e}^{\delta_A}-1}{\delta_A} \tag{5.190}$$

を用いた．さらに，式 (5.188) の左辺は $A(t)\mathrm{e}^{\Phi(t)}$ の形に書き直せるので，式 (5.188) を変形して $d\Phi(t)/dt$ を求めると，

$$\begin{aligned}\frac{d\Phi(t)}{dt} &= \frac{1}{\Delta(\Phi(t))}\mathrm{e}^{-\Phi(t)}A(t)\mathrm{e}^{\Phi(t)} \\ &= \frac{1}{\Delta(-\Phi(t))}\mathrm{e}^{-\delta_{\Phi(t)}}A(t) = \frac{1}{\Delta(\Phi(t))}A(t) \\ &= \frac{\delta_{\Phi(t)}}{\mathrm{e}^{\delta_{\Phi(t)}}-1}A(t)\end{aligned} \tag{5.191}$$

となる．ここで，等式 (5.184) に対応する関係式[1~4, 13]

$$\mathrm{e}^{A}Q\mathrm{e}^{-A} = \mathrm{e}^{\delta_A}Q\ ;\ \delta_A Q \equiv [A,Q] = AQ - QA \tag{5.192}$$

を用いた．量子微分方程式 (5.191) は $\Phi(t)$ の複雑な非線形方程式で解けそうに見えないが，実は $\delta_{\Phi(t)}$ が $\{\delta_{A(s)}\}$ を用いて表せることに気づけば，次のように解析的に解が求まる．すなわち，式 (5.184) と式 (5.186) より導かれる超演算子の等式

$$\delta_{\Phi(t)} = \log\exp(\delta_{\Phi(t)}) = \log\exp\left(\int_{t_0}^{t}\delta_{A(s)}ds\right) \tag{5.193}$$

を利用して，次の便利な公式が求まる[3]．

公式 5.25　順序づき指数演算子の対数 (5.187) は次式で与えられる：

$$\begin{aligned}\Phi(t) &= \log\exp_+\left(\int_{t_0}^{t}A(s)ds\right) \\ &= \int_{t_0}^{t}\frac{\log\exp_+(\int_{t_0}^{t'}\delta_{A(s)}ds)}{\exp_+(\int_{t_0}^{t'}\delta_{A(s)}ds)-1}A(t')dt' \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n+1}\int_{t_0}^{t}\left(1-\exp_+\left(\int_{t_0}^{t'}\delta_{A(s)}ds\right)\right)^n A(t')dt'.\end{aligned} \tag{5.194}$$

ここで注目すべきことは，$\Phi(t)$ が $\{A(s)\}$ の交換子の線形結合で表されるという美しい事実である．これは BCH 公式（定理）の拡張になっている．実際，公式 5.25 を通常の指数演算子積の対数に関する公式 5.13 と比較すると，その類似性がよくわかる．その理由は，順序づき演算子 $U(t_1, t_0)$ は，公式 5.21 すなわち，積公式 $U(t_1, t_0) = U(t_1, t)U(t, t_0)$ の性質より，次の指数演算子積の極限とみなすことができるからである：$t_1 - t_0 = n\Delta s, s_j = t_0 + j\Delta s \ (j = 1, \cdots, n)$ として

$$U(t_1, t_0) = \lim_{\substack{n\to\infty \\ \Delta s\to 0}} \mathrm{e}^{A(s_n)\Delta s}\mathrm{e}^{A(s_{n-1})\Delta s} \cdots \mathrm{e}^{A(s_1)\Delta s}. \tag{5.195}$$

ちなみに，順序づき指数演算子の入った量をコンピューターで数値的に求める際には，充分大きな n に対する式 (5.195) またはそれを改良した近似式が用いられる[1]．

本節では，順序づき指数演算子に代表されるような量子汎関数の微分（変分）について詳しく説明し，量子解析の方法論が変分問題にまで広く拡張できることを示した．量子汎関数のテイラー展開を定式化し，特に順序づき指数演算子のテイラー展開の 1 次式を詳しく議論した．また，この演算子の対数の一般公式を導き，BCH 定理と同じく，すべての項が交換子の線形結合で表せることを示した．

非線形非平衡系の物理への応用については次章で議論することにする．特に，散逸系を再び取り上げ，熱場ダイナミクスの定式化を踏まえて議論し，変分原理への応用にもふれる[4]．

参考文献

1) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
2) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
3) M. Suzuki, *J. Math. Phys.* **38**, 1183 (1997).
4) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998).
5) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2017 年第 3 刷）．
6) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
7) Y. Takahashi and H. Umezawa, *Collective Phenom.* **2**, 55 (1975).
8) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4483 (1985).
9) D. Pez, *J. Math. Phys.* **35**, 780 (1994).
10) M. Suzuki, *Rev. in Math. Phys.* Vol.**11**, No.2, 243 (1999).
11) W. Magnus, A. Karrass and D. Solitar, *Combinatorial group theory* (Dover, New York, 1976).
12) R.I. McLachlan, *BIT.* **35** (2), 258 (1995).
13) M. Le Bellac, *et al.* 著，『統計物理学ハンドブック』，鈴木増雄，豊田正，香取眞理，飯高敏晃，羽田野直道訳，（朝倉書店，2007）．
14) R. Kubo, *J. Math. Phys.* **4**, 174 (1963).

第 6 章
熱場ダイナミクスの定式化と非平衡統計物理への応用

6.1 熱場ダイナミクスの一般的定式化とその物理的意義

標準的な統計力学では，物理量は統計集団を表す密度行列に基づく平均値として与えられる[1)]．これを，熱的な状態ベクトルを用いて場の理論的に，表現する「**熱場ダイナミクス**（Thermo Field Dynamics；以下，**TFD** と略記する）」を定式化する．この定式化で基本的な役割を果たす「一般表現定理」を詳しく解説し，その有効性を説明する．さらに，この熱場の状態ベクトルを非平衡系に拡張し，それが従う「熱場の基礎方程式」を導く．また，非対称な TFD の定式化も行う．最後に，チルダ空間の熱浴としての役割にもふれる．

6.1.1 TFD の定式化と一般表現定理

(i) 問題の設定

統計力学では，物理量 A の期待値は，系の統計集団（アンサンブル）の平均

$$\langle A \rangle = \sum_j P_j A_j = \mathrm{Tr}\, \rho A \tag{6.1}$$

で与えられる[1)]．ここで，古典系では，式 (6.1) の第 2 式のように，A_j の値をとる確率 P_j を用いて平均 $\langle A \rangle$ が求まる．量子系では，系の確率分布を表す密度行列 ρ を用いて式 (6.1) の最後の表式のように，期待値は 2 つの演算子の積 ρA のトレースをとることによって与えられる．一方，場の理論では，真空ベクトル $|0\rangle$ を用いて A の期待値は

$$\langle A \rangle = \langle 0|A|0 \rangle \tag{6.2}$$

と与えられる．式 (6.1) と式 (6.2) を比較すると，後者では，場の理論の方法が使えるので都合の良いことが多い．そこで，今までに多くの人々が，温度 T や時間 t を含む状態を用いて，期待値を表そうと試みた．その結果，もとのヒルベルト (Hilbert) 空間の状態では，これは不可能であるが，次のように，ヒルベ

ルト空間を2重に拡張することによって可能であることがわかった[1~6)].

(ii) 2重ヒルベルト空間—歴史的な定式化

なぜ2重ヒルベルト空間が必要かというと，演算子を状態ベクトルで両側から挟むと，一般に非対角要素も現れる．それを取り除くために，次のようにクロネッカーのデルタ $\delta_{m,n}$ を用いる必要がある：

$$\langle A\rangle = \sum_{m,n}\langle m|\rho A|n\rangle\delta_{m,n}. \tag{6.3}$$

ここで，歴史的には，状態 $\{|n\rangle\}$ は系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ の固有状態としてTFD の定式化が行われてきた[1~3)]：

$$\mathscr{H}|n\rangle = E_n|n\rangle. \tag{6.4}$$

この規格化された完全直交系 $\{|n\rangle\}$ を用いると，平衡系の密度行列

$$\rho_{\rm eq} = \frac{{\rm e}^{-\beta\mathscr{H}}}{Z(\beta)};\beta = \frac{1}{k_{\rm B}T} \tag{6.5}$$

および状態和 $Z(\beta) = {\rm Tr}\ \exp(-\beta\mathscr{H})$ に対して，A の熱平均は，式 (6.3) より

$$\langle A\rangle = \sum_{m,n}{\rm e}^{-\beta E_m}\langle m|A|n\rangle\frac{\delta_{m,n}}{Z(\beta)} \tag{6.6}$$

と書ける．クロネッカーのデルタ $\delta_{m,n}$ を状態ベクトルの内積で表すために，もとのヒルベルト空間と全く同形のチルダ空間 $\tilde{\mathscr{H}}$ を導入する．その規格化された固有ベクトルを $\{|\tilde{n}\rangle\}$ のように**チルダ**（tilde）“~” をつけて表す：

$$\tilde{\mathscr{H}}|\tilde{n}\rangle = E_n|\tilde{n}\rangle. \tag{6.7}$$

もとの空間とチルダ空間の直積空間のベクトルを $|m\rangle|\tilde{n}\rangle \equiv |m,\tilde{n}\rangle$ および $\langle\tilde{n},m| \equiv \langle\tilde{n}|\langle m|$ と書くと，演算子 A はもとのヒルベルト空間の演算子であり，**チルダ空間**のベクトル $\langle\tilde{m}|$ には作用しないから，式 (6.6) の中の $\langle m|A|n\rangle\delta_{m,n}$ の部分は

$$\begin{aligned}\langle m|A|n\rangle\delta_{m,n} &= \langle m|A|n\rangle\langle\tilde{m}|\tilde{n}\rangle\\ &= \langle m,\tilde{m}|A|n,\tilde{n}\rangle\end{aligned} \tag{6.8}$$

と書き換えられる．したがって，式 (6.6) は

$$\langle A\rangle = \sum_{m,n}\left(\frac{{\rm e}^{-\frac{1}{2}\beta E_m}}{Z(\beta)^{1/2}}\right)\langle\tilde{m},m|A|n,\tilde{n}\rangle\left(\frac{{\rm e}^{-\frac{1}{2}\beta E_n}}{Z(\beta)^{1/2}}\right) \tag{6.9}$$

と書き表せる．そこで，2重ヒルベルト空間の温度 T（すなわち逆温度 β）を含むベクトル

$$|{\rm O}(\beta)\rangle = \sum_{n}\left(\frac{{\rm e}^{-\frac{1}{2}\beta E_n}}{Z(\beta)^{1/2}}\right)|n,\tilde{n}\rangle \tag{6.10}$$

を定義すると，A の熱平均は，この状態 $|{\rm O}(\beta)\rangle$ の期待値として次のように表せ

ることになる：

$$\langle A\rangle = \langle \mathrm{O}(\beta)|A|\mathrm{O}(\beta)\rangle. \tag{6.11}$$

このTFDの表現形式は一見単なる数学的トリックのように思えるが，次に議論するように物理的に深い意味づけをすることができる．

(iii) TFDの一般表現定理

ここでは，ハミルトニアンの固有ベクトル $\{|n\rangle\}$ を用いて定義された熱場の状態ベクトル (6.10) を使い易い形に一般化する．

まず，熱場の状態ベクトル $|\mathrm{O}(\beta)\rangle$ は，コンパクトに

$$|\mathrm{O}(\beta)\rangle = \rho_{\mathrm{eq}}^{1/2}|I\rangle \tag{6.12}$$

および

$$|I\rangle = \sum_n |n,\tilde{n}\rangle \tag{6.13}$$

と表せることに注意する．さらに，ディラックのブラとケットの関係と同様に，元のヒルベルト空間のベクトル $|\psi\rangle = a|m\rangle + b|n\rangle$ に対して，それに対応するチルダ空間のベクトル $|\tilde{\psi}\rangle$ を

$$|\tilde{\psi}\rangle = a^*|\tilde{m}\rangle + b^*|\tilde{n}\rangle \tag{6.14}$$

のように定義する[1~6]．ただし，a^*, b^* は，それぞれ a, b の複素共役である．この定義の下では，次のように大変便利な定理が成り立つ．

定理 6.1（TFDの一般表現定理[4]） 式 (6.13) で定義される，**2重空間**における TFD の基本ベクトル $|I\rangle$ は，任意の完備直交ベクトルの組 $\{|\alpha\rangle\}$ に対しても不変である．すなわち，

$$|I\rangle = \sum_n |n,\tilde{n}\rangle = \sum_\alpha |\alpha,\tilde{\alpha}\rangle \tag{6.15}$$

と表せる．

証明 ハミルトニアン $\mathscr{H}$ の規格化された固有状態 $|n\rangle$ を任意の完備直交ベクトルの組 $\{|\alpha\rangle\}$ で展開する：

$$|n\rangle = \sum_\alpha U_{n\alpha}|\alpha\rangle. \tag{6.16}$$

ここで，$\{U_{n\alpha}\}$ はユニタリ行列である．すなわち，

$$\sum_n U_{n\alpha}U_{n\gamma}^* = \delta_{\alpha\gamma} \tag{6.17}$$

の関係式が成り立つ．チルダ空間のベクトルの定義式 (6.14) より，チルダベクトル $|\tilde{n}\rangle$ は，

$$|\tilde{n}\rangle = \sum_\alpha U_{n\alpha}^*|\tilde{\alpha}\rangle \tag{6.18}$$

で与えられる．したがって，**TFD** の基本ベクトル $|I\rangle$ は，

$$\begin{aligned}|I\rangle &= \sum_n |n\rangle|\tilde{n}\rangle = \sum_n\sum_\alpha\sum_\gamma U_{n\alpha}U^*_{n\gamma}|\alpha\rangle|\tilde{\gamma}\rangle \\ &= \sum_\alpha\sum_\gamma\left(\sum_n U_{n\alpha}U^*_{n\gamma}\right)|\alpha,\tilde{\gamma}\rangle = \sum_\alpha\sum_\gamma \delta_{\alpha\gamma}|\alpha,\tilde{\gamma}\rangle \\ &= \sum_\alpha |\alpha,\tilde{\alpha}\rangle \end{aligned} \tag{6.19}$$

となり，定理 6.1 が証明された．

ここで注意しておきたいことは，期待値 $\langle A\rangle$ が表現ベクトルによらないことは当り前のよく知られたことであるが，定理 6.1 の主張は，TFD の基本ベクトル $|I\rangle$ が表示によらないことであり，したがって熱場の状態ベクトル $|\mathrm{O}(\beta)\rangle$ そのものが，ハミルトニアン $\mathscr{H}$ によってのみ決まり，2 重ベクトル空間の表示によらない，物理的に不変な，意味のある対象であるということである[4]．したがって，実用的には，ハミルトニアンが可解な形でない，相互作用している一般の多体系でも，基本ベクトル $|I\rangle$ は容易に書き下すことができる．例えば，ハイゼンベルグ模型（相互作用が $-J\boldsymbol{S}_i\cdot\boldsymbol{S}_j$ の和で表されるスピン系）の固有ベクトルは 2 次元以上では一般に求められない．しかし，定理 6.1 を用いると，（よく知られた）z-方向のスピン $\{S_j^z\}$ の固有ベクトルを用いて TFD の熱場の状態ベクトル $|\mathrm{O}(\beta)\rangle$ が表されることになり，大変便利である[4~6]．このことから，最近，密度行列くり込み群の方法[7]や TFD を用いた量子エンタングルメントの研究[8]に有効に利用されつつある．

6.1.2 TFD による非平衡系の定式化—熱場の基礎方程式

この節では，非平衡系の統計力学を TFD を用いて記述する方法を解説する．通常は，時間に依存する密度行列 $\rho(t)$ のみたすフォン・ノイマン方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}(t),\rho(t)] \tag{6.20}$$

から出発する．ここで，$\mathscr{H}(t)$ は，時間 t に依存する系のハミルトニアンを表す．方程式 (6.20) の解として密度行列 $\rho(t)$ が求まれば，任意の物理量 A の時刻 t における平均値 $\langle A\rangle_t$ は

$$\langle A\rangle_t = \mathrm{Tr}\,A\rho(t) \tag{6.21}$$

によって与えられる．

さて，TFD の視点に立つと，式 (6.11) に対応し，時刻 t の 2 重ヒルベルト空間の状態 $|\varPsi(t)\rangle$ とそれに共役な状態 $\langle\varPsi(t)|$ を用いて，平均値 $\langle A\rangle_t$ は

$$\langle A\rangle_t = \langle\varPsi(t)|A|\varPsi(t)\rangle \tag{6.22}$$

と表される[1~6]．ただし，状態 $|\Psi(t)\rangle$ は，密度行列 $\rho(t)$ と式 (6.13) で定義される基本ベクトル $|I\rangle$ を用いて，

$$|\Psi(t)\rangle = \rho^{1/2}(t)|I\rangle \tag{6.23}$$

で与えられる．

この状態 $|\Psi(t)\rangle$ に関して次の定理が成り立つ[4~6]．

定理 6.2（熱場の基礎方程式） 式 (6.23) で定義される状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ は，次の方程式をみたす：

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{\mathscr{H}}(t)|\Psi(t)\rangle; \hat{\mathscr{H}}(t) = \mathscr{H}(t) - \tilde{\mathscr{H}}(t). \tag{6.24}$$

ただし，$\tilde{\mathscr{H}}(t)$ はチルダ空間のハミルトニアンであり，$\mathscr{H}(t)$ と全く同形である．すなわち，固有値 $\{E_n(t)\}$ は一致する：

$$\mathscr{H}(t)|n(t)\rangle = E_n(t)|n(t)\rangle \tag{6.25}$$

および

$$\tilde{\mathscr{H}}(t)|\tilde{n}(t)\rangle = E_n(t)|\tilde{n}(t)\rangle. \tag{6.26}$$

証明 量子解析[9]により導かれる公式 (5.43) から

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho^{1/2}(t) = [\mathscr{H}(t), \rho^{1/2}(t)] \tag{6.27}$$

が成り立つ．この公式は，また式 (6.20) の形式解

$$\rho(t) = U(t,t_0)\rho(t_0)U^{-1}(t,t_0) \tag{6.28}$$

を用いて導くこともできる[1]．ここで，$U(t,t_0)$ は，ハミルトニアン $\mathscr{H}(t)$ の順序づき指数演算子 (5.175)，すなわち

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \exp_+\left(\int_{t_0}^t \mathscr{H}(s)ds\right) \\ &= 1 + \int_{t_0}^t \mathscr{H}(t_1)dt_1 + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \mathscr{H}(t_1)\mathscr{H}(t_2) + \cdots \\ &\quad + \int_{t_0}^t dt_1 \int_{t_0}^{t_1} dt_2 \cdots \int_{t_0}^{t_{n-1}} dt_n \mathscr{H}(t_1)\mathscr{H}(t_2)\cdots\mathscr{H}(t_n) + \cdots \end{aligned} \tag{6.29}$$

で表されるユニタリー演算子である．これより，

$$\rho^{1/2}(t) = U(t,t_0)\rho^{1/2}(t_0)U^{-1}(t,t_0) \tag{6.30}$$

と表されることが容易にわかる．なぜならば，

$$\left(U(t,t_0)\rho^{1/2}(t_0)U^{-1}(t,t_0)\right)^2 = U(t,t_0)\rho(t_0)U^{-1}(t,t_0) = \rho(t) \tag{6.31}$$

をみたすからである．したがって，式 (6.30) の両辺を t で微分すると

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho^{1/2}(t) &= \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U(t,t_0)\rho^{1/2}(t_0)U^{-1}(t,t_0) \\
&\quad + U(t,t_0)\rho^{1/2}(t_0)\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}U^{-1}(t,t_0) \\
&= \mathscr{H}(t)\rho^{1/2}(t) - \rho^{1/2}(t)\mathscr{H}(t) = [\mathscr{H}(t), \rho^{1/2}(t)] \qquad (6.32)
\end{aligned}
$$

となり，再び，式 (6.27) が導かれる[6]．

さて，式 (6.27) を用いると，別々のヒルベルト空間で定義される $\rho^{1/2}(t)$ と $\tilde{\mathscr{H}}(t)$ は可換であるから，

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} &= [\mathscr{H}(t), \rho^{1/2}(t)]|I\rangle \\
&= \mathscr{H}(t)\rho^{1/2}(t)|I\rangle - \rho^{1/2}(t)\mathscr{H}(t)|I\rangle \\
&= \mathscr{H}(t)|\Psi(t)\rangle - \rho^{1/2}(t)\tilde{\mathscr{H}}(t)|I\rangle \\
&= \mathscr{H}(t)|\Psi(t)\rangle - \tilde{\mathscr{H}}(t)\rho^{1/2}(t)|I\rangle \\
&= \bigl(\mathscr{H}(t) - \tilde{\mathscr{H}}(t)\bigr)|\Psi(t)\rangle = \hat{\mathscr{H}}(t)|\Psi(t)\rangle \qquad (6.33)
\end{aligned}
$$

となり，基本式 (6.24) が証明された．ここで，次の公式を用いた．

公式 6.1　TFD の基本ベクトル $|I\rangle$ にハミルトニアン $\mathscr{H}(t)$ と $\tilde{\mathscr{H}}(t)$ を作用させたものは一致する：

$$
\tilde{\mathscr{H}}(t)|I\rangle = \mathscr{H}(t)|I\rangle. \qquad (6.34)
$$

証明　TFD の基本ベクトル $|I\rangle$ は，TFD の一般表現定理 6.1 より，$\mathscr{H}(t)$（および $\tilde{\mathscr{H}}(t)$）の固有ベクトル $\{|n(t)\rangle\}$ を用いて，

$$
|I\rangle = \sum_n |n(t), \tilde{n}(t)\rangle \qquad (6.35)
$$

と書ける．したがって，

$$
\begin{aligned}
\tilde{\mathscr{H}}(t)|I\rangle &= \sum_n |n(t)\rangle\bigl(\tilde{\mathscr{H}}(t)|\tilde{n}(t)\rangle\bigr) \\
&= \sum_n |n(t)\rangle\bigl(E_n(t)|\tilde{n}(t)\rangle\bigr) \\
&= \sum_n \bigl(\mathscr{H}(t)|n(t)\rangle\bigr)|\tilde{n}(t)\rangle = \mathscr{H}(t)|I\rangle \qquad (6.36)
\end{aligned}
$$

となり，式 (6.34) が示された．

6.1.3　非対称な TFD の定式化

通常の場の理論では，場の状態 $|\mathrm{O}\rangle$ とそれに共役な状態 $\langle\mathrm{O}|$ によって，任意の物理量（の演算子）A の両側から作用させて，式 (6.2) のように，A の期待値を求める．物性物理の問題，例えば，動的イジング模型[10,11]の取り扱いなどでは，次のように非対称な状態を用いたほうが便利なこともある[10,11]：

$$\langle A\rangle_t = \langle I|A(\rho(t)|I\rangle). \tag{6.37}$$

これを一般化すると，任意の α $(0 \leq \alpha \leq 1)$ に対して

$$\langle A\rangle_t = {}_{1-\alpha}\langle \Psi(t)|A|\Psi(t)\rangle_\alpha \tag{6.38}$$

とも表せる．ただし，一般化された熱場の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle_\alpha$ は

$$|\Psi(t)\rangle_\alpha = \rho^\alpha(t)|I\rangle \tag{6.39}$$

で定義され，その時間変化は，定理 6.2 の基礎方程式と同形になる．すなわち，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle_\alpha = \hat{\mathscr{H}}(t)|\Psi(t)\rangle_\alpha \tag{6.40}$$

となる．

ついでながら，$|\Psi(t)\rangle_\alpha$ は，次の意味で規格化されている．すなわち，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\,{}_{1-\alpha}\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle_\alpha = {}_{1-\alpha}\langle \Psi(t)| - \hat{\mathscr{H}}(t) + \hat{\mathscr{H}}(t)|\Psi(t)\rangle_\alpha = 0 \tag{6.41}$$

より，$t=0$ で規格化されていれば，

$${}_{1-\alpha}\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle_\alpha = {}_{1-\alpha}\langle \Psi(0)|\Psi(0)\rangle_\alpha = 1 \tag{6.42}$$

である．あるいは，直接次の関係式からもわかる：

$${}_{1-\alpha}\langle \Psi(t)|\Psi(t)\rangle_\alpha = \langle I|\rho(t)|I\rangle = \mathrm{Tr}\,\rho(t) = 1. \tag{6.43}$$

6.1.4 拡張されたハミルトニアン $\hat{\mathscr{H}}(t)$ の意義

ここで，熱場の状態ベクトルのダイナミクスが‘拡張された熱場ハミルトニアン’ $\hat{\mathscr{H}}(t) = \mathscr{H}(t) - \tilde{\mathscr{H}}(t)$ で記述される理由について述べたい．それは，チルダ空間の状態ベクトル $|\tilde{\Psi}\rangle$ が式 (6.14) のように複素共役の係数を用いて定義されているので，

$$\begin{aligned}|\tilde{\psi}(t)\rangle &= \exp_+\left(-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \tilde{\mathscr{H}}(s)ds\right)|\tilde{\psi}(0)\rangle \\ &= \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t (-\tilde{\mathscr{H}}(s))ds\right)|\tilde{\psi}(0)\rangle\end{aligned} \tag{6.44}$$

のように，チルダ空間のハミルトニアン $\tilde{\mathscr{H}}(t)$ に負符号がついたもので，$|\tilde{\psi}(t)\rangle$ が記述されるからである．

また，熱場の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ の基礎方程式 (6.24) の形式解は次式で与えられる：

$$|\Psi(t)\rangle = \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^t \hat{\mathscr{H}}(s)ds\right)|\Psi(0)\rangle. \tag{6.45}$$

この表式は，次節で，線形応答理論[1, 12]および非線形応答の一般論を定式化するのに用いられる[1]．

6.1.5　チルダ空間の熱浴としての役割

以上の定式化でわかる通り，TFD のチルダ空間は，最初はトレースをとる数学的手段として導入されたものであるが，いろいろと発展させていく中で，その物理的な意味が理解されるようになりつつある．その一つは，チルダ空間の熱浴としての役割である[13]．まだ，完全に意味づけされたわけではないが，小さなスピン系が熱浴と接している場合に，その熱浴との相互作用を TFD を用いてうまく消去すると，その効果は，もとのヒルベルト空間とチルダ空間との相互作用として表されることが示されている[13]．

もとのヒルベルト空間と全く同形のチルダ空間を導入することにより定式化された TFD は，様々な特徴・利点を持っている．まず，第 1 に，TFD を用いると，場の理論のように，熱場の状態ベクトルを用いて物理現象を捉えるので，巨視的にコヒーレントな状態（例えば，超伝導[3]やアンダーソンのフラストレートしたスピン状態[14]）などの平均場近似理論[5]や変分的な理論[5]が作り易くなる．第 2 に，非平衡系における線形応答理論[12]（特に KMS 条件の捉え方）や一般の非線形応答の定式化が見通しよくなる[1,5,15]．これらについては，次節で詳しく述べる．ついでながら，この 2 重ヒルベルト空間を用いた，言わば「量子熱場ダイナミクス」に対して，動的古典系のダイナミクスを量子力学的に定式化する際には，実ヒルベルト空間だけを用いた，言わば「古典熱場ダイナミクス」の定式化[10]が有効であることを第 13 章で説明する．

6.2　TFD による応答理論の一般化

本節では，久保の線形応答理論を詳しく解説する．さらに TFD（熱場ダイナミクス）の定式化を用いて非線形の**応答理論の一般論**を量子解析の立場から説明し，輸送係数の一般的な公式と不可逆性についてふれる．TFD による KMS 条件と変分理論についても簡単に述べる．

6.2.1　線形応答と久保公式

まず，久保の線形応答理論[12]の解説から始める．非平衡系の密度行列 $\rho(t)$ は，次のフォン・ノイマン方程式

$$i\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathcal{H}(t), \rho(t)]; \mathcal{H}(t) = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t) \equiv \mathcal{H}_0 - \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{F}(t) \qquad (6.46)$$

にしたがう[1]．ここで，$\mathcal{H}_0$ は外力 $\boldsymbol{F}(t)$ のないときの系のハミルトニアンを表し，$\boldsymbol{A}$ は外力 $\boldsymbol{F}(t)$ に共役な物理量を表す演算子である．後で詳しく述べる典型的な 2 つの例としては，磁界 $\boldsymbol{H}(t)$ とそれに共役な磁化

$$\boldsymbol{M} = g\mu_{\mathrm{B}}\sum_{j=1}^{N} S_j^z; S_j^z = 粒子\ j\ のスピン演算子, \qquad (6.47)$$

および，電界 $\boldsymbol{E}(t)$ とそれに共役な物理量（の演算子）

$$\boldsymbol{A} = \mathrm{e}\sum_{j=1}^{N} \boldsymbol{r}_j \tag{6.48}$$

などがある．これらの例では，$\mathcal{H}_1(t)$ は，それぞれ，$\mathcal{H}_1(t) = -\boldsymbol{M}\cdot\boldsymbol{H}(t)$ および $\mathcal{H}_1(t) = -\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E}(t)$ である．

さて，外力 $\boldsymbol{F}(t)$ があまり大きくない場合には，外力の 1 次までの近似（線形近似）で物理現象が充分記述できる．そこで，$\rho(t)$ を外力で次のように展開する：

$$\rho(t) = \rho_{\mathrm{eq}} + \rho_1(t) + \cdots ; \rho_{\mathrm{eq}} = \frac{1}{Z(\beta)}\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0}. \tag{6.49}$$

ただし，

$$Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0} \tag{6.50}$$

である．1 次の項 $\rho_1(t)$ は次の方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t) = [\mathcal{H}_0, \rho_1(t)] + [\mathcal{H}_1(t), \rho_{\mathrm{eq}}] \tag{6.51}$$

の解として与えられる[12]．方程式 (6.51) は，内部微分 $\delta_{\mathcal{H}_0}$ を用いて[9]

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\delta_{\mathcal{H}_0}\rho_1(t) + R(t); R(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathcal{H}_1(t), \rho_{\mathrm{eq}}] \tag{6.52}$$

の形に書けるので，初期条件 $\rho_1(t_0) = 0$ に対するこの方程式の解は

$$\rho_1(t) = \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{\frac{t-s}{\mathrm{i}\hbar}\delta_{\mathcal{H}_0}} R(s)ds = \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{\frac{(t-s)\mathcal{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}} R(s)\mathrm{e}^{\frac{(s-t)\mathcal{H}_0}{\mathrm{i}\hbar}} ds \tag{6.53}$$

と与えられる．ここで，よく知られた等式 (5.77)，すなわち，

$$\mathrm{e}^{t\delta_A}B = \mathrm{e}^{tA}B\mathrm{e}^{-tA} \tag{6.54}$$

を用いた．さらに，$R(t)$ は久保の恒等式[12]

$$[A, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0}] = \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0}\int_0^{\beta} \mathrm{e}^{\lambda\mathcal{H}_0}[\mathcal{H}_0, A]\mathrm{e}^{-\lambda\mathcal{H}_0}d\lambda \tag{6.55}$$

を用いて，物理的に見易い形に次のように変形できる[12,16]：

$$\begin{aligned} R(t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathcal{H}_1(t), \rho_{\mathrm{eq}}] = -\frac{1}{Z(\beta)}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A, \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0}]F(t) \\ &= -\rho_{\mathrm{eq}}\cdot\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_0^{\beta} \mathrm{e}^{\lambda\mathcal{H}_0}[\mathcal{H}_0, A]\mathrm{e}^{-\lambda\mathcal{H}_0}d\lambda\cdot F(t) \\ &= \rho_{\mathrm{eq}}\int_0^{\beta} \mathrm{e}^{\lambda\mathcal{H}_0}\dot{A}\mathrm{e}^{-\lambda\mathcal{H}_0}d\lambda\cdot F(t) = \rho_{\mathrm{eq}}\int_0^{\beta} \dot{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda)d\lambda\cdot F(t). \end{aligned} \tag{6.56}$$

ここで，演算子 A の微分 $\dot{A}$ は，密度行列 $\rho(t)$ の微分方程式（フォン・ノイマン方程式）の符号とは異なり

$$\dot{A} = -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathcal{H}_0, A] \tag{6.57}$$

で定義される[1]．また，演算子 B の**相互作用表示** $B(t)$ は

$$B(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t\mathcal{H}_0}{\hbar}} B \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t\mathcal{H}_0}{\hbar}} \tag{6.58}$$

で与えられる[1,16]．

実は，久保の恒等式 (6.55) は，量子解析[9]における量子微分の良い例になっている．すなわち，恒等式 (6.55) は，次の量子微分の公式[9]

$$\delta_{\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}}} A = \frac{d\mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}}}{d\mathcal{H}} \delta_{\mathcal{H}} A \tag{6.59}$$

と等価である[17]．ここで，量子微分の公式[9]

$$\frac{df(X)}{dX} = \frac{\delta_{f(X)}}{\delta_X} = \frac{f(X) - f(X - \delta_X)}{\delta_X} = \int_0^1 f^{(1)}(X - t\delta_X)dt \tag{6.60}$$

を用いた．上式で，$f(X) = f(\mathcal{H}_0) = \mathrm{e}^{-\beta\mathcal{H}_0}$ とおくと，最後の積分表示より，久保の λ-積分の表式 (6.55) が得られる（積分変数の置換 $\beta t = \lambda$ を行った）．

さて，$R(t)$ の式 (6.56) を式 (6.53) に代入すると，密度行列の 1 次の項 $\rho_1(t)$ が次のように求まる：

$$\rho_1(t) = \rho_{\mathrm{eq}} \int_{t_0}^{t} ds \int_0^{\beta} d\lambda F(s) \cdot \dot{A}(s - t - \mathrm{i}\hbar\lambda). \tag{6.61}$$

したがって，任意の物理量 B の外力 $F(t)$ に対する 1 次の応答 $\Delta\langle B\rangle_t$ は

$$\Delta\langle B\rangle_t = \langle B\rangle_t - \langle B\rangle_{\mathrm{eq}} = \mathrm{Tr}\,\rho_1(t)B = \int_{t_0}^{t} ds \int_0^{\beta} d\lambda F(s)\langle \dot{A}(s-t-\mathrm{i}\hbar\lambda)B\rangle_{\mathrm{eq}} \tag{6.62}$$

と表される[1,12,16,17]．初期時刻 $t_0 = -\infty$ で熱平衡状態にあったとすると，式 (6.62) は

$$\Delta\langle B\rangle_t = \int_0^{\infty} ds \int_0^{\beta} d\lambda \langle \dot{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda)B(s)\rangle_{\mathrm{eq}} F(t - s) \tag{6.63}$$

と表せる．

特に，観測する物理量 B として，電流などの流れの演算子 $\boldsymbol{J} = \dot{A}$ を考えると，（$\langle \boldsymbol{J}\rangle_{\mathrm{eq}} = 0$ であるから）1 次の応答 $\boldsymbol{j}(t) \equiv \langle \boldsymbol{J}\rangle_t$ は，

$$\boldsymbol{j}(t) = \int_0^{\infty} ds \int_0^{\beta} d\lambda \langle \boldsymbol{J}(-\mathrm{i}\hbar\lambda)\boldsymbol{J}(s)\rangle_{\mathrm{eq}} F(t - s) \tag{6.64}$$

と書ける．この公式は大変興味深い形をしている．すなわち，非平衡系の流れの期待値が平衡系での流れ演算子の時間相関関数で表される．これは一般に久保公式と呼ばれている[18]．量子効果（流れ $\boldsymbol{J}$ と系のハミルトニアン $\mathcal{H}_0$ との非可換性）が**久保の $\boldsymbol{\lambda}$-積分**で表されている．

ここで，プランク定数 $\hbar$ を零とおくと，

$$j^{(1)}(t) = \beta \int_0^\infty \langle \boldsymbol{J}\boldsymbol{J}(s) \rangle_{\mathrm{eq}} F(t-s) ds \tag{6.65}$$

となる．さらに，外力が時間によらず，一定の値 F （または収束因子 $\mathrm{e}^{\varepsilon t}$ をつけて $F(t) = F\mathrm{e}^{\varepsilon t}$）のときは，次のアインシュタイン・オンサーガーの公式となる[1]：

$$j^{(1)}(t) = \sigma F; \sigma = \beta \int_0^\infty \langle \boldsymbol{J}\boldsymbol{J}(t) \rangle_{\mathrm{eq}} \mathrm{e}^{-\varepsilon t} dt. \tag{6.66}$$

ただし，収束因子 $\mathrm{e}^{\varepsilon t}$ の中の ε は時間積分の後で零とおく（$\varepsilon \to +0$）．

6.2.2　久保理論と不可逆性

前項で解説した久保理論はアインシュタイン・オンサーガーの現象論の量子統計力学的な体系化になっている．前項で久保公式の導出を丁寧に説明したのには，深い物理的な理由がある．出発点となるフォン・ノイマン方程式 (6.46) は時間反転に対して不変な式であり，可逆である．実際，$\rho(t)$ の時間変化はユニタリー変換で表され，フォン・ノイマンエントロピーは変化しない[1]：

$$\frac{d}{dt} S_{ノイマン}(t) = -k_{\mathrm{B}} \frac{d}{dt} \mathrm{Tr}\, \rho(t) \log \rho(t) = 0. \tag{6.67}$$

そのような可逆な基礎方程式から，不可逆な輸送現象の式が一次の摂動計算で，厳密に導出できるとは長年予想できなかった[18, 19]．実際，有限系では，外力が t によらない場合の伝導度 σ は，$\varepsilon \to +0$ の極限で，

$$\begin{aligned} \sigma &= \mathrm{Tr}\, \rho_{\mathrm{eq}} \int_0^\infty dt \mathrm{e}^{-\varepsilon t} \int_0^\beta d\lambda \dot{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda) \dot{A}(t) \\ &= \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \mathrm{Tr}\, A[A, \rho_{\mathrm{eq}}] = 0 \end{aligned} \tag{6.68}$$

となり，公式 (6.64) は物理的に意味がなくなる[16, 20]．すなわち，有限系では不可逆性は出てこない．体積を先に無限大にし，ポアンカレサイクルの時間を無限大にしてから，時間積分を行うと正の値を持つ σ が求められ，次章で詳しく述べるように，エントロピー生成が正となり，不可逆性が導出できる[16]．

6.2.3　TFD による応答理論

前節で解説した TFD の定式化に基づいて，その状態 $|\Psi(t)\rangle$ を用いると，任意の物理量 A の時刻 t での期待値 $\langle A \rangle_t$ は

$$\langle A \rangle_t = \langle \Psi(t) | A | \Psi(t) \rangle \tag{6.69}$$

と与えられる．ただし，TFD の状態 $|\Psi(t)\rangle$ は次の方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = \hat{\mathcal{H}}(t) |\Psi(t)\rangle; \hat{\mathcal{H}}(t) = \mathcal{H}(t) - \tilde{\mathcal{H}}(t) \tag{6.70}$$

の解として与えられる[1]．この解は，**順序づき指数演算子**[1, 21]を用いて

$$
\begin{aligned}
|\Psi(t)\rangle &= \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\mathcal{H}}(s)ds\right)|\Psi(t_0)\rangle \qquad (6.71)\\
&= \left(1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\mathcal{H}}(t_1)dt_1+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^2\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\hat{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}(t_2)+\cdots\right.\\
&\quad +\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\\
&\quad \left.\times\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\hat{\mathcal{H}}(t_1)\hat{\mathcal{H}}(t_2)\cdots\hat{\mathcal{H}}(t_n)+\cdots\right)|\Psi(t_0)\rangle \qquad (6.72)
\end{aligned}
$$

と与えられる[1,4~6]．

さて，系のハミルトニアンが，式 (6.46) のように，

$$\mathcal{H}(t)=\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1(t)\equiv\mathcal{H}_0-\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{F}(t) \qquad (6.73)$$

と与えられたとき，外力 $\boldsymbol{F}(t)$ に対する（非線形）応答を求めることにする．TFD の形式では，

$$\hat{\mathcal{H}}(t)=\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}_1(t);\hat{\mathcal{H}}_1(t)=\mathcal{H}_1(t)-\tilde{\mathcal{H}}_1(t) \qquad (6.74)$$

とおいて，状態 $|\Psi(t)\rangle$ を $\hat{\mathcal{H}}_1(t)$ に関して展開すればよい．そこで，次の公式を用いる．

公式 6.2　順序づき指数演算子に関して，次の展開ができる：

$$
\begin{aligned}
&\exp_+\left(\int_{t_0}^{t}(A+B(s))ds\right)\\
&= \mathrm{e}^{(t-t_0)A}\left(1+\sum_{n=1}^{\infty}\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_nB[t_1]\cdots B[t_n]\right). \qquad (6.75)
\end{aligned}
$$

ただし，$B[t]$ は次式で定義される：

$$B[t]=\mathrm{e}^{-(t-t_0)A}B(t)\mathrm{e}^{(t-t_0)A}. \qquad (6.76)$$

これは**量子テイラー展開**[22]の拡張になっている．この公式を直接導出するには，式 (6.75) の左辺に $\mathrm{e}^{-(t-t_0)A}$ をかけた式を $f(t)$ とおき，それが次の**線形量子微分方程式**

$$\frac{df(t)}{dt}=B[t]f(t) \qquad (6.77)$$

をみたすことを確かめればよい．（ここで，$B(t)$ と $B(t')$ が $t'\neq t$ に対して非可換であることに注意してほしい．そのために，微分方程式 (6.77) の解は通常の指数関数では表せず，順序づき指数演算子を用いて表すことになる．この意味で，式 (6.77) は量子微分方程式と呼ばれる[9,22]．）

公式 6.2 を用いると，TFD の状態ベクトル $|\Psi(t)\rangle$ は，次のように展開できる：

$$|\Psi(t)\rangle = \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}(\hat{\mathcal{H}}_0+\hat{\mathcal{H}}_1(s))ds\right)|\Psi(t_0)\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0}\left(1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\hat{\mathcal{H}}_1[t_1]+\cdots+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots \right.$$
$$\left. \times\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_n\hat{\mathcal{H}}_1[t_1]\hat{\mathcal{H}}_1[t_2]\cdots\hat{\mathcal{H}}_1[t_n]+\cdots\right)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{6.78}$$

ただし，$\hat{\mathcal{H}}_1[t]$ は次式で定義される：

$$\begin{aligned}\hat{\mathcal{H}}_1[t] &= \mathrm{e}^{-\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0}\hat{\mathcal{H}}_1(t)\mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0} \\ &= -\boldsymbol{A}(t)\cdot\boldsymbol{F}(t)+\tilde{\boldsymbol{A}}(t)\cdot\boldsymbol{F}^*(t).\end{aligned} \tag{6.79}$$

ここで，$\boldsymbol{A}(t)$ は

$$\boldsymbol{A}(t)=\mathrm{e}^{-\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0}\boldsymbol{A}\mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathcal{H}}_0} \tag{6.80}$$

で定義される．

上の $|\Psi(t)\rangle$ の摂動展開の公式 (6.78) を用いると，物理量 B の任意の次数の応答が求められる．すなわち，それは，

$$\langle B\rangle_t=\langle\Psi(t)|B|\Psi(t)\rangle=\langle B\rangle_{\mathrm{eq}}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\langle\Psi(t_0)|[B[t],\mathcal{H}_1(t_1)]|\Psi(t_0)\rangle dt_1+\cdots \tag{6.81}$$

と表され，再び，線形応答の式 (6.63) が導ける．高次の項も同様に流れの高次相関関数の時間積分で表される．さらに，B と $\tilde{\mathcal{H}}_1$ とは可換であり，また $\mathcal{H}_1$ も $\tilde{\mathcal{H}}_1$ と可換であることを用いると，

$$\langle B\rangle_t=\langle\Psi(t_0)|U^+(t,t_0)BU(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle \tag{6.82}$$

と表すこともできる．ただし，$U(t,t_0)$ は次式で定義される**時間発展演算子**である：

$$\begin{aligned}U(t,t_0) &= \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}(\mathcal{H}_0+\mathcal{H}_1(s))ds\right) \\ &= \mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\mathcal{H}_0}\exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathcal{H}_1[s]ds\right).\end{aligned} \tag{6.83}$$

ただし，$\mathcal{H}_1[t]$ は，ここでは，式 (6.76) の A の代わりに $\mathcal{H}_0$ を用いて定義される．もちろん，式 (6.82) は，$\rho(t)$ の一般的な公式

$$\rho(t)=U(t,t_0)\rho(t_0)U^+(t,t_0) \tag{6.84}$$

を用いて直接導くこともできる[1,12,16]．上の 2 つの導き方のどちらがわかり易いかは，a) 状態ベクトルに着目するのが理解し易いか，または，b) 演算子または超演算子 $\delta_{\mathcal{H}_1(s)}$ を用いて変形するのがなじみ易いかという好みの問題になる．通常は，後者の方法を用いて，$\langle B\rangle_t$ の高次の（一般的な）表式は，式 (6.84) より，

$$
\begin{aligned}
\langle B\rangle_t &= \mathrm{Tr}\,\rho(t)B = \mathrm{Tr}\,U(t,t_0)\rho(t_0)U^+(t,t_0)B \\
&= \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)U^+(t,t_0)BU(t,t_0) \\
&= \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)\exp_-\left(-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\delta_{\mathcal{H}_1[s]}ds\right)B(t,t_0) \\
&= \mathrm{Tr}\,\rho(t_0)B(t,t_0) - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathrm{Tr}\,\rho(t_0)[\mathcal{H}_1[s],B(t,t_0)]ds \\
&\quad + \cdots + \left(-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{Tr}\,\rho(t_0)\delta_{\mathcal{H}_1(t_n)}\cdots \\
&\quad \times\delta_{\mathcal{H}_1(t_1)}B(t,t_0)+\cdots
\end{aligned}
\tag{6.85}
$$

と表される[1,12]．ただし，$B(t,t_0)$ は

$$
B(t,t_0) = \mathrm{e}^{-\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\mathcal{H}_0}B\mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\mathcal{H}_0}
\tag{6.86}
$$

で定義される．

これらの一般的な表式は，次章で輸送現象のエントロピー生成を導く際に有効に利用される[16,22]．

6.2.4 TFD における KMS 条件

任意の演算子 A と B の平衡状態における**時間相関関数** $\langle A(t)B(t')\rangle_{\mathrm{eq}}$ は虚時間方向に次のような周期性

$$
\langle A(t)B(t')\rangle_{\mathrm{eq}} = \langle B(t')A(t+\mathrm{i}\hbar\beta)\rangle_{\mathrm{eq}}
\tag{6.87}
$$

を持っていることが知られている．これは Kubo–Martin–Schwinger 条件（略して KMS 条件）[12,23] と呼ばれ，無限系の平衡状態を数学的に規定するのに使われる重要な関係式である[1,6]．これは，TFD における次の関係式[6]

$$
A(t)|\mathrm{O}(\beta)\rangle = \tilde{A}^+\left(t-\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\beta\right)|\mathrm{O}(\beta)\rangle
\tag{6.88a}
$$

および

$$
\langle\mathrm{O}(\beta)|A(t) = \langle\mathrm{O}(\beta)|\tilde{A}^+\left(t+\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\beta\right)
\tag{6.88b}
$$

からも容易に導くこともできる．すなわち，

$$
\begin{aligned}
\langle A(t)B(t')\rangle_{\mathrm{eq}} &= \langle\mathrm{O}(\beta)|A(t)B(t')|\mathrm{O}(\beta)\rangle \\
&= \langle\mathrm{O}(\beta)|\tilde{A}^+\left(t+\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\beta\right)\tilde{B}^+\left(t'-\frac{1}{2}\mathrm{i}\hbar\beta\right)|\mathrm{O}(\beta)\rangle \\
&= \langle\mathrm{O}(\beta)|\tilde{A}^+(t+\mathrm{i}\hbar\beta)\tilde{B}^+(t')|\mathrm{O}(\beta)\rangle \\
&= \langle\mathrm{O}(\beta)|B(t')A(t+\mathrm{i}\hbar\beta)|\mathrm{O}(\beta)\rangle \\
&= \langle B(t')A(t+\mathrm{i}\hbar\beta)\rangle_{\mathrm{eq}}
\end{aligned}
\tag{6.89}
$$

となる[6]．

6.2.5 TFD による変分理論

TFD では，2 重空間の状態ベクトル $|\mathrm{O}(\beta)\rangle$ を用いて平衡状態を表すので，変分理論が作り易い[6]．すなわち，変分パラメータ θ を含む近似的な状態ベクトル $|\Psi(\theta)\rangle$ を作り，これを用いて，エネルギー

$$E(\theta) = \langle \Psi(\theta)|\mathcal{H}|\Psi(\theta)\rangle \tag{6.90}$$

やエントロピー $S(\theta)$ を求め，ヘルムホルツの自由エネルギー

$$F(\theta) = E(\theta) - TS(\theta) \tag{6.91}$$

を最小にするように変分パラメータ θ を決める．

この変分理論は，スピン系の平均場近似の公式を求めたり，アンダーソンの RVB 状態を表現するのにも大変便利である[6]．

本節では，応答理論，特に久保の線形応答理論を詳しく説明した．この説明には必ずしも TFD は必要ないが，KMS 条件などを説明するのには，TFD の表式のほうがわかり易いと思われる．

次章では，線形応答の久保理論とズバーレフの非線形応答の理論を統合し発展させた「非平衡カノニカル理論」を解説する．この非線形応答まで含めた一般的な定式化に基づいて，散逸的な輸送現象におけるエントロピー生成を導く．

参考文献

1) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
2) Y. Takahashi and H. Umezawa, *Collect. Phenom.* **2**, 55 (1975).
3) H. Umezawa, H. Matsumoto and M. Tachiki, *Thermo Field Dynamics and Condensed States* (North-Holland, Amsterdam, New York, London, 1982).
4) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4483 (1985).
5) M. Suzuki, *J. Stat. Phys.* Vol.**42**, Nos.5/6 1047 (1986).
6) M. Suzuki, in *Progress in Quantum Field Theory.* edited by H. Ezawa and S. Kamefuchi (North-Holland, Amsterdam, Oxford, New York, Tokyo, 1986).
7) A.E. Feiguin and S.R. White, *Phys. Rev. B***72**, 220401 (2005).
8) Y. Hashizume and M. Suzuki, *Physica A***392**, 3518 (2013).
9) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
10) B.U. Felderhof and M. Suzuki, *Physica* **56**, 43 (1971).
11) M. Suzuki and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **24**, 51 (1968).
12) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
13) Y. Hashizume, M. Suzuki and S. Okamura, *Physica A***419**, 506 (2015).
14) P.W. Anderson, *Mat. Res. Bull.* **8**, 151 (1973).
15) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B*, Vol.**5**, No.11, 1821 (1991).
16) M. Suzuki, *Physica A* **390**, 1904 (2011); *A***391**, 1074 (2012); *A***392**, 314 (2013); *A***392**, 4279 (2013).
17) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **100**, 475 (1998).
18) H. Nakano, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 77 (1955).
19) H. Nakano, *Int. J. Mod. Phys. B* **7**, 2397 (1986).
20) R. Kubo, M. Toda, N. Hashitsume, *Statistical Physics II, Non Equlibrium Mechanics*, in Springer Series in Solid State Sciences, Springer, 1991.
21) R. Kubo, *J. Math. Phys.* **4**, 174 (1963).
22) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2017 年第 3 刷）．
23) P. Martin and J. Schwinger, *Phys. Rev.* **115**, 1342 (1959).

第 7 章

非平衡統計力学のカノニカル理論

7.1 不可逆な輸送現象とエントロピー生成

本章では，線形応答理論におけるエントロピー生成の問題を第 1 原理的にフォン・ノイマン方程式の解の対称性から解き明かす．その結果を一般の非線形応答にも拡張する．熱伝導現象を記述する「熱界」という概念を導入し，有効ハミルトニアンを構築する．それを用いて，熱伝導度に関する久保公式を導く．

7.1.1 久保の線形応答理論におけるエントロピー生成の問題

前章で，**久保理論**[1)]を詳しく解説した．この理論では，系の密度行列 $\rho(t)$ を，平衡系の密度行列 $\rho_{\rm eq}$ から外場 $\boldsymbol{F}$ の 1 次まで展開し，その 1 次の項 $\rho_1(t)$ から，流れ $\boldsymbol{j}$ の公式，いわゆる久保公式[1)]

$$\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{F};\ \sigma = \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle \boldsymbol{J}(-{\rm i}\hbar\lambda)\boldsymbol{J}(t)\rangle {\rm e}^{-\varepsilon t} \tag{7.1}$$

を求めた．$\boldsymbol{J}$ は電流などの流れの演算子である（前章では，外力が時間 t に依存する一般的な場合を議論したが，本章では外力が断熱因子 ${\rm e}^{\varepsilon t}$ を除いて一定の場合を考える）．

特に，外場 $\boldsymbol{F}$ が電界（場）$\boldsymbol{E}$ の場合には，ジュール熱が単位時間当り，$\boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{E} = \sigma E^2$ 発生するので，熱力学的には，これを温度 T で割ってエントロピー生成 $dS/dt \equiv \sigma_S$ は

$$\sigma_S = \frac{dS}{dt} = \frac{\sigma \boldsymbol{E}^2}{T} = \frac{\sigma E^2}{T} \tag{7.2}$$

と与えられることになる．したがって，前章で議論したように，系の体積を先に無限大にしてから，時間積分を行うと，**輸送係数**（今の場合は電気伝導度）σ が正になる（$\sigma > 0$）ので，正のエントロピー生成が熱力学的に示されたことになる．しかし，エントロピー生成の式 (7.2) を系の密度行列 $\rho(t)$ から直接導くことは長年の難問であった．それが最近やっと第 1 原理的に解決された[2)]（と

筆者は確信している).

この難問を解く手掛りは，次のような試行錯誤を重ねて見つかった[2].

(i) フォン・ノイマンエントロピーの第1近似評価

非平衡系のエントロピーの変化を議論する際には，まずフォン・ノイマンエントロピー

$$S_{ノイマン}(t) \equiv -k_{\rm B} \mathrm{Tr}\, \rho(t) \log \rho(t) \tag{7.3}$$

に着目する．しかし，ハミルトニアン $\mathscr{H}(t)$ で記述される孤立系の密度行列 $\rho(t)$ は次のフォン・ノイマン方程式

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \rho(t) = [\mathscr{H}(t), \rho(t)];\ \mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1(t) \tag{7.4}$$

に従うので，このユニタリー変換で時間変化する密度行列 $\rho(t)$ に対しては，よく知られているように，フォン・ノイマンエントロピー (7.3) は一定である．

ところで，正確な密度行列 $\rho(t)$ ではなく，外場 $\boldsymbol{E}$ の1次までのヒルベルト空間に，いわば射影した密度行列

$$\rho_{久保}(t) = \rho_0 + \rho_1(t), \quad \rho_0 = \rho_{\rm eq} \tag{7.5}$$

および

$$\rho_1(t) = \int_{t_0}^{t} U_0(t-s) \frac{1}{\mathrm{i}\hbar} [\mathscr{H}_1(s), \rho_0] U_0^{\dagger}(t-s) ds;\ U_0(t) = \exp\left(\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0\right) \tag{7.6}$$

を式 (7.3) の $\rho(t)$ の代わりに用いたエントロピー

$$S^{(久保)}_{ノイマン}(t) = -k_{\rm B} \mathrm{Tr}(\rho_0 + \rho_1(t)) \log(\rho_0 + \rho_1(t)) \tag{7.7}$$

は，一般に時間に依存する．対数部分 $\log(\rho_0 + \rho_1(t))$ を，量子テイラー展開の公式を利用して $\rho_1(t)$ に関して外場の2次まで展開し，式 (7.7) のエントロピーの式を $\mathrm{O}(E^2)$ まで多大の労力をかけて求めて，それを時間微分しても，残念ながら，正しいエントロピー生成の式 (7.2) は得られない．久保理論[1]が発表される前後にも，この試みは行われたようである[3]．これが成功しない理由は後で述べる“正しい導出法”の解説を読めばわかる．

(ii) エネルギー保存則の検討から手掛りを発見

静電界中の孤立系の場合のようにハミルトニアンが $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1$（例えば，$\mathscr{H}_1 = -e\sum_j \boldsymbol{r}_j \cdot \boldsymbol{E} \equiv -\boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{E}$）で与えられるとき，各近似に対して，エネルギー $\langle \mathscr{H} \rangle_t$ の時間変化を調べてみると，次のようなことが容易にわかる[2,4]：

$$\langle \mathscr{H} \rangle_{1次} \equiv \mathrm{Tr}\, \mathscr{H}(\rho_0 + \rho_1(t)) = 保存しない,$$
$$\langle \mathscr{H} \rangle_{2次} \equiv \mathrm{Tr}\, \mathscr{H}(\rho_0 + \rho_1(t) + \rho_2(t)) = 保存する,$$
$$\vdots$$

$$\langle \mathscr{H} \rangle_{(2n-1)\text{次}} \equiv \mathrm{Tr}\,\mathscr{H}(\rho_0 + \rho_1(t) + \cdots + \rho_{2n-1}(t)) = \text{保存しない},$$
$$\langle \mathscr{H} \rangle_{2n\text{次}} \equiv \mathrm{Tr}\,\mathscr{H}(\rho_0 + \rho_1(t) + \cdots + \rho_{2n}(t)) = \text{保存する}. \tag{7.8}$$

これらの事実は，任意の演算子 A と B に対して成り立つ恒等式 $\mathrm{Tr}\,A[A,B]=0$ などをくり返し用いることで証明できる．より物理的には密度行列 $\{\rho_n(t)\}$ の対称性の議論からも直観的にわかる．まず，演算子 $\boldsymbol{A} = e\sum_j \boldsymbol{r}_j$ は空間反転操作 $\boldsymbol{r}_j \to -\boldsymbol{r}_j$ に対して明らかに反対称的（odd）である（$\boldsymbol{A} \to -\boldsymbol{A}$，すなわち $\mathscr{H}_1 \to -\mathscr{H}_1$）．それに対して，系の内部的相互作用や各組成粒子の運動エネルギーなどからなるハミルトニアン $\mathscr{H}_0$ は空間反転操作に対して対称的（even）である（$\mathscr{H}_0 \to \mathscr{H}_0$）．トレースが空間積分を含むので，これらの性質より，

$$\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_0\rho_{2n-1}(t) = 0, \quad \mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_1\rho_{2n}(t) = 0;\ n = 1, 2, \cdots \tag{7.9}$$

が成り立つ（それ以外は時間微分も含めて一般に零にならない）．

さて，熱力学的に，（すなわち現象論的に）導かれたエントロピー生成の式 (7.2) を，密度行列（すなわち非平衡状態の分布）の時間変化から，第 1 原理的に導出するには，熱力学の第 1 法則であるエネルギー保存則を保証する密度行列を用いるのが論理的である．この視点から，代数的構造を表す関係式 (7.8) を眺めてみると，エントロピー生成を導くためには，最低次でも外場の 2 次まで考慮する必要があることに気づく．

7.1.2 線形応答におけるエントロピー生成の導出と対称性

前項の議論からわかる通り，線形応答の流れ（電流）$\boldsymbol{j}$ は式 (7.1) のように外場に比例する（ところまで扱う）が，エントロピー生成は最低次でも式 (7.2) のように外場（電界）の 2 次に比例するスカラー量であり，外場の反転に関して対称的である．そこで，前項 (ii) のエネルギー保存則の考察の結果をヒントにして，系の内部エネルギー $\langle \mathscr{H}_0 \rangle_t$ の時間変化（単位時間当りに発生するジュール熱）を密度行列の 2 次の項 $\rho_2(t)$ まで取り入れて計算してみる．2 次の項 $\rho_2(t)$ は，フォン・ノイマン方程式 (7.4) より微分方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_2(t) = [\mathscr{H}_0, \rho_2(t)] + [\mathscr{H}_1(t), \rho_1(t)] \tag{7.10}$$

をみたす．したがって，内部エネルギーの時間微分は

$$\frac{d}{dt}\langle \mathscr{H}_0 \rangle_t = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}(\mathscr{H}_0[\mathscr{H}_0, \rho_2(t)] + \mathscr{H}_0[\mathscr{H}_1(t), \rho_1(t)])$$
$$= -\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}[\mathscr{H}_1(t), \mathscr{H}_0]\rho_1(t) = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{F}\rho_1(t) = \langle \boldsymbol{J} \rangle \boldsymbol{F} = \boldsymbol{j}\cdot\boldsymbol{F} = \sigma F^2 \tag{7.11}$$

と求まる．ここで，時間微分してから，式 (7.6) の初期時刻 t_0 を $t_0 = -\infty$ とおいた．また，$\mathscr{H}_1(t) = -\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{F}$ と仮定し，流れ（電流）$\boldsymbol{J}$ は

$$\boldsymbol{J} = \dot{\boldsymbol{A}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{A}, \mathscr{H}_0] \tag{7.12}$$

で定義される．したがって，流れの期待値 $\langle \boldsymbol{j} \rangle$ は $\langle \boldsymbol{j} \rangle = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{j}\rho_1(t)$ で与えられる．

こうして，エントロピー生成 σ_S は，式 (7.11) を温度 T で割って

$$\sigma_S = \frac{1}{T}\frac{d}{dt}\langle \mathscr{H}_0 \rangle_t = \frac{\sigma F^2}{T} \tag{7.13}$$

と正しく導出される．まとめると，線形応答の範囲では，流れは密度行列 $\rho(t)$ の反対称成分 $\rho_{\mathrm{odd}}^{(1)}(t) \equiv \rho_1(t)$ から

$$\boldsymbol{j} = \mathrm{Tr}\, \boldsymbol{J}\rho_{\mathrm{odd}}^{(1)}(t) = \sigma \boldsymbol{F} \tag{7.14}$$

と与えられ，エントロピー生成 σ_S は密度行列 $\rho(t)$ の対称成分 $\rho_{\mathrm{even}}^{(2)}(t) \equiv \rho_0 + \rho_2(t)$ から

$$\sigma_S = \frac{1}{T}\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\, \mathscr{H}_0 \rho_{\mathrm{even}}^{(2)}(t) \tag{7.15}$$

と与えられる[2,4]．ここで，$\rho_{\mathrm{odd}}(t)$ と $\rho_{\mathrm{even}}(t)$ を高次まで摂動展開で表すと

$$\rho_{\mathrm{odd}}(t) = \rho_1(t) + \rho_3(t) + \cdots + \rho_{2n-1}(t) + \cdots \tag{7.16}$$

および

$$\rho_{\mathrm{even}}(t) = \rho_0 + \rho_2(t) + \cdots + \rho_{2n}(t) + \cdots \tag{7.17}$$

となる．後で再び一般的に議論するように，密度行列の対称成分がエントロピー生成を与えるという事実は一般の非線形応答でも成り立つ．これは，(ii) で調べた通り，エネルギー保存則を摂動展開で確かめるには外場の偶数次まで考慮する必要があることと対応している．

このように，**不可逆性を第 1 原理的に導くためには，線形応答に限っても，状態の変化は外場の 2 次まで考慮しなければならないのである**．

7.1.3 熱伝導に対する久保公式と熱界の導入

(i) 熱界の導入による久保公式の導出

熱伝導現象を扱うには，特別な工夫が必要である[2,5~8]．それは系の境界条件としての温度差の効果を記述する力学的ハミルトニアンが存在しないからである．それでも，**熱伝導度**は熱流演算子の時間相関関数の時間積分で与えられることが現象論的に示されている[5]．

ここでは，最近筆者によって導入された熱を運ぶ粒子に対する「熱界」を用いて，**熱伝導度に対する久保公式**を導くことにする[9]．

まず，たとえ話から入ることにしよう．雌の蚊は人畜を刺し血を吸う．しかも動物の呼吸で排出される二酸化炭素（CO_2）の濃度差を感知して効率よく動物に近づく．一点で濃度差を認識することは不可能であるから，濃さの違いを知るためには行きつ戻りつ，ある局所領域を飛び回る必要がある．

これと同様に，温度も一点で定義することは不可能であり，局所的な領域での粒子の運動エネルギーの平均値を局所平衡の温度 $T(\boldsymbol{r})$ として定義すること

になる．このくり込まれた領域（の中心座標）$\boldsymbol{r}_j$ の局所エネルギー（平均的な運動エネルギー ε_j と不純物による散乱効果 u_j の和など）を h_j とする[9]．このエネルギー h_j を持つ言わば“有効粒子”の感じる温度差を

$$\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}} = \frac{1}{\beta_0}\nabla\beta(\boldsymbol{r});\ \beta(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T(\boldsymbol{r})} \tag{7.18}$$

によって定義し，これを「熱界」と呼ぶことにする[9]．（$\boldsymbol{r}_j$ を $\boldsymbol{r}$ と連続化して扱うことにする．また，β_0 は逆温度の次元を持つ特徴的な量である．したがって，熱界 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ は ∇ の次元，すなわち長さの逆数の次元を持つ.）一方，熱流（heat current）$\boldsymbol{J}_{\mathrm{H}}$ は，この有効粒子の温度 $\boldsymbol{v}_j$ を用いて

$$\boldsymbol{J}_{\mathrm{H}} = \sum_j \{h_j \boldsymbol{v}_j\} = \frac{1}{2}\sum_j (h_j\boldsymbol{v}_j + \boldsymbol{v}_j h_j) \tag{7.19}$$

と表される．この熱流 $\boldsymbol{J}_{\mathrm{H}}$ に共役な演算子 $\boldsymbol{A}_{\mathrm{H}}$ は，その時間微分 $\dot{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{H}}$ が次式

$$\dot{\boldsymbol{A}}_{\mathrm{H}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{A}_{\mathrm{H}}, \mathscr{H}_0];\ \mathscr{H}_0 = \sum_j h_j,\ h_j = \varepsilon_j + u_j \tag{7.20}$$

をみたすように定義する[9]．局所領域 $\boldsymbol{r}_j$ の全運動量を $\boldsymbol{p}_j$ とすると，$\boldsymbol{r}_j$ との間の交換関係 $[\boldsymbol{r}_j, \boldsymbol{p}_j] = \mathrm{i}\hbar$ を用いて，次の式

$$\boldsymbol{A}_{\mathrm{H}} = \sum_j \{h_j \boldsymbol{r}_j\} = \frac{1}{2}\sum_j (h_j\boldsymbol{r}_j + \boldsymbol{r}_j h_j) \tag{7.21}$$

で定義される演算子 $\boldsymbol{A}_{\mathrm{H}}$ は式 (7.20) をみたすことがわかる．こうして，くり込まれた粒子系の有効ハミルトニアンは，熱界 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ とそれに共役な演算子 $\boldsymbol{A}_{\mathrm{H}}$ を用いて，

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A}_{\mathrm{H}} \cdot \boldsymbol{E}_{\mathrm{T}} \tag{7.22}$$

と書けることがわかる．

また，力学的ハミルトニアンの場合と同様の定式化により，熱流は，$\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ の 1 次の範囲で次の関係式をみたす．

$$\boldsymbol{j}_{\mathrm{H}} = \langle \boldsymbol{J}_{\mathrm{H}} \rangle = \kappa \boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}. \tag{7.23}$$

熱伝導度 κ は，熱流演算子 $\boldsymbol{j}_{\mathrm{H}}$ の時間相関関数を用いて

$$\kappa = \int_0^\infty ds \int_0^\beta d\lambda \mathrm{e}^{-\varepsilon s} \langle \boldsymbol{J}_{\mathrm{H}} \boldsymbol{J}_{\mathrm{H}}(s + \mathrm{i}\hbar\lambda) \rangle_0 \tag{7.24}$$

と表される[9]．熱伝導に対しても久保公式が成り立つことがこの議論からもわかる．

(ii) 熱伝導とエントロピー生成

以上の定式化を物理的に解釈すると，体系の両端に温度差をつけて熱界 $\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}$ を作り，それによって体系に熱エネルギーを与え，体系の内部エネルギー $\langle \mathscr{H}_0 \rangle_t$ を上昇させ，エントロピー生成が起こる．すなわち，電気伝導と同様に，エン

トロピー生成 σ_S は

$$\sigma_S = \frac{dS}{dt} = \frac{1}{T}\frac{d}{dt}\langle\mathscr{H}_0\rangle_t = \frac{\boldsymbol{j}_{\mathrm{H}}\cdot\boldsymbol{E}_{\mathrm{T}}}{T} = \frac{\kappa E_{\mathrm{T}}^2}{T} \tag{7.25}$$

と与えられる．この熱界の導入による熱伝導の定式化では，低温側での熱の取り出し操作による定常化は行われていないので，体系の温度が上がってしまうことになる[2)]．むしろ，これによって不可逆性を示すエントロピー生成が第 1 原理的に導かれる．

熱力学的には，高温側（温度 $T+\Delta T$）から長さ L だけ離れた低温側（温度 T）に，単位時間当り（かつ単位面積当り）j_{H} の熱エネルギーが流れることによる（単位面積当りの）エントロピーの増加率 dS/dt は

$$\sigma_S = \frac{dS}{dt} = \frac{1}{L}j_{\mathrm{H}}\left(\frac{1}{T} - \frac{1}{T+\Delta T}\right) = \frac{j_{\mathrm{H}}E_{\mathrm{T}}}{T};\ E_{\mathrm{T}} = \frac{\Delta T}{L}\cdot\frac{1}{T} \tag{7.26}$$

と求められる．これと式 (7.25) は一致している．こうして，エントロピー生成の第 1 原理的な導出の正当性が熱伝導の場合にも示される．

7.1.4 密度行列の時間微分と極限操作 $t_0 = -\infty$ の順序

静電界中の電気伝導のように，外場 F が時間によらない場合，すなわち，式 (7.4) の $\mathscr{H}_1(t)$ が時間 t によらない場合には，一見戸惑うことがある．このときの式 (7.6) の $\rho_1(t)$ は

$$\rho_1(t) = \int_{t_0}^{t} \mathrm{e}^{\frac{t-s}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathscr{H}_1,\rho_0]\mathrm{e}^{-\frac{t-s}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}ds \tag{7.27}$$

と書ける．ここで，初期 t_0 を先に $t_0 = -\infty$ とおくと，時間の変数変換をすることにより，式 (7.27) は

$$\rho_1(t) = \int_0^{\infty} \mathrm{e}^{\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathscr{H}_1,\rho_0]\mathrm{e}^{-\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}dt = \text{一定} \tag{7.28}$$

となる．したがって時間によらない定常な密度行列となり，時間微分 $\rho_1'(t) = 0$ となってしまう．逆に，t_0 を有限な値に固定して，式 (7.27) を時間 t で微分すると，フォン・ノイマン方程式 (7.4) に対応する元の式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\rho_1(t) = [\mathscr{H}_0, \rho_1(t)] + [\mathscr{H}_1, \rho_0] \tag{7.29}$$

が得られる．このように，無限大の極限操作を行う場合には，その順番に気をつけなければならない．すなわち，この場合には，時間微分を先にする必要がある．

この注意は，次節に解説するスバーレフ理論でも重要である．特に，久保理論との関係を議論する際には本質的になる．

7.1.5 非線形応答理論とエントロピー生成

前節では，非線形応答理論の一般論を量子解析[10)]の立場から説明した．すなわち，系のハミルトニアン $\mathscr{H}(t)$ が

$$\mathscr{H}(t) = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1(t);\ \mathscr{H}_1(t) = -\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{F}(t) \tag{7.30}$$

と 2 つの和で書ける場合に，フォン・ノイマン方程式 (7.4) の解は，前章の表式 (6.84)，すなわち，

$$\rho(t) = U(t,t_0)\rho(t_0)U^\dagger(t,t_0) \tag{7.31}$$

で与えられる．ここで，時間発展演算子 $U(t,t_0)$ は式 (6.83)，すなわち，順序づき指数演算子を用いて

$$\begin{aligned} U(t,t_0) &= \exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}(\mathscr{H}_0+\mathscr{H}_1(s))ds\right) \\ &= \mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}\exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathscr{H}_1[s]ds\right). \end{aligned} \tag{7.32}$$

ただし，

$$\mathscr{H}_1[t] = \mathrm{e}^{\frac{-(t-t_0)}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}\mathscr{H}_1(t)\mathrm{e}^{\frac{t-t_0}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0} \tag{7.33}$$

によって定義される．また，式 (7.32) の中の順序づき指数演算子は

$$\begin{aligned} &\exp_+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathscr{H}_1[s]ds\right) = 1+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\int_{t_0}^{t}\mathscr{H}_1[t_1]dt_1+\cdots \\ &+\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^n\int_{t_0}^{t}dt_1\int_{t_0}^{t_1}dt_2\cdots\int_{t_0}^{t_{n-1}}dt_1\mathscr{H}_1[t_1]\cdots\mathscr{H}_n[t_n]+\cdots \end{aligned} \tag{7.34}$$

と与えられる．この公式を用いると，フォン・ノイマン方程式 (7.4) の解 $\rho(t)$ は，すでに 7.1.2 項で述べた通り，

$$\rho(t) = \rho_{\mathrm{odd}}(t) + \rho_{\mathrm{even}}(t) \tag{7.35}$$

の如く，**対称成分** $\rho_{\mathrm{even}}(t)$ と**反対称成分** $\rho_{\mathrm{odd}}(t)$ の 2 つの和で表される．これらは，それぞれ式 (7.17) と式 (7.16) で与えられる．

線形応答の場合 (7.14) を拡張して，非線形の一般の流れ $\boldsymbol{j}$ は

$$\boldsymbol{j} = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{J}\rho(t) = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{J}\rho_{\mathrm{odd}}(t) = \sigma_F\boldsymbol{F} \tag{7.36}$$

の形に与えられる．ここで，σ_F は力 F を含む非線形の輸送係数である．さらに，エントロピー生成 $\sigma_S(t)$ も

$$\begin{aligned} \sigma_S(t) &= \frac{1}{T(t)}\frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_0\rho_{\mathrm{even}}(t) = \frac{1}{T(t)}\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_0\frac{d}{dt}\rho_{\mathrm{even}}(t) \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{T(t)}\left(\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_0[\mathscr{H}_0,\rho_{\mathrm{even}}(t)] + \mathrm{Tr}\,\mathscr{H}_0[\mathscr{H}_1(t),\rho_{\mathrm{odd}}(t)]\right) \\ &= -\frac{1}{T(t)}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}[\mathscr{H}_1(t),\mathscr{H}_0]\rho_{\mathrm{odd}}(t) = \mathrm{Tr}\,\boldsymbol{J}\cdot\boldsymbol{F}\rho_{\mathrm{odd}}(t) \\ &= \langle\boldsymbol{J}\rangle_F\cdot\boldsymbol{F} = \boldsymbol{j}_F\cdot\boldsymbol{F} = \sigma_F F^2 > 0 \end{aligned} \tag{7.37}$$

となり，正のエントロピー生成が導かれる[2,4]．ただし，時間 t に依存する温度 $T(t)$ は，内部エネルギー $\langle \mathscr{H}_0 \rangle_t$ から定義される．すなわち，$\beta(t) = 1/k_B T(t)$ は，$-\partial \log \exp(-\beta(t)\mathscr{H}_0)/\partial\beta(t) = \langle \mathscr{H}_0 \rangle_t$ の解として与えられる．

要するに，流れという現象は，状態の反対称性成分によって記述され，正のエントロピー生成という不可逆性の本質は，対称なゆらぎによって記述されるということである．

線形および非線形輸送現象の流れは状態密度 $\rho(t)$ の反対称成分で記述され，不可逆性の本質であるエントロピー生成は対称成分で記述されることが示された．次節では，本節で保留しておいたズバーレフの理論を解説し，久保の線形応答理論との関係を議論し，2 つの理論を統合し，発展させた「カノニカル理論」を説明する．

7.2　散逸ダイナミクスのカノニカル理論

本節では，非平衡定常状態を扱う現象論的な理論であるズバーレフのスキームを詳しく解説する[6,8]．次に，久保の線形応答の理論[1]との関係も論じ[4,7]，それを踏まえて散逸ダイナミクスのカノニカル理論を定式化する．これは，指数形の密度行列により，非線形の流れと同時にエントロピー生成を記述する新理論である．すでに確率過程ではよく知られているファン・カンペン–久保の「**示量性の仮定**」[11~13]が新理論でも成り立っていることが示される．さらに，「散逸ダイナミクスの新理論」と平衡統計力学のカノニカル集団の理論との相似性と相違についても議論する．

7.2.1　ズバーレフ理論—熱伝導や非線形応答への現象論的拡張

熱伝導現象を統計力学的に扱う理論として，**ズバーレフの理論**がよく知られている[6,8]．この理論では，温度差の効果を外力を用いて表すのではなく，次のような局所平衡分布で記述するものである：

$$\rho_{\rm loc} = \exp\left(-\Phi - \int \beta(x)h(x)dx\right) \equiv {\rm e}^{\eta_{\rm loc}}. \tag{7.38}$$

ただし，Φ は規格化条件 ${\rm Tr}\,\rho_{\rm loc} = 1$ より決まる熱力学的関数である．局所ハミルトニアン $h(x)$ は，座標 x における局所的エネルギー密度を表す演算子である．また，温度差（温度変化）は逆温度 $\beta(x) = 1/k_B T(x)$ を通して表される．次に系のハミルトニアン

$$\mathscr{H}_0 = \int h(x)dx \tag{7.39}$$

で時間変化する「局所分布」

$$\rho_{\rm loc}(t) = \exp\left(\frac{t-t_0}{{\rm i}\hbar}\mathscr{H}_0\right)\rho_{\rm loc}\exp\left(-\frac{t-t_0}{{\rm i}\hbar}\mathscr{H}_0\right) \equiv {\rm e}^{\eta_{\rm loc}(t_0-t)} \tag{7.40}$$

を考える．ただし，$\eta_{\mathrm{loc}}(0) = \eta_{\mathrm{loc}}$ である．

ズバーレフ[6,10,13]は，線形応答理論を踏まえて，初期時刻 t_0 から断熱因子 $\mathrm{e}^{-\varepsilon(t-t_0)}$（ただし，$\varepsilon$ は正の無限小）を $\eta(t-t_0)$ にかけ，$t_0 = -\infty$ から観測時刻 t まで積分し平均化した量

$$\eta_{\mathrm{Zub}} = \varepsilon\int_{-\infty}^{t} \mathrm{e}^{-\varepsilon(t-t_0)}\eta_{\mathrm{loc}}(t_0 - t)dt_0 = \varepsilon\int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{\varepsilon t}\eta_{\mathrm{loc}}(t)dt$$
$$= \eta_{\mathrm{loc}} - \int_{-\infty}^{0} \mathrm{e}^{\varepsilon t}\dot{\eta}_{\mathrm{loc}}(t)dt \tag{7.41}$$

を定義し，これを用いて次の非平衡統計演算子

$$\rho_{\mathrm{Zub}} = \mathrm{e}^{-\Phi+\eta_{\mathrm{Zub}}} \tag{7.42}$$

を導入した[6]．ただし，Φ は規格化条件 $\mathrm{Tr}\,\rho_{\mathrm{Zub}} = 1$ より決まる非平衡ポテンシャルである．式 (7.41) の最後の表式からわかる通り，η_{Zub} は時間に依存しない．すなわち，ρ_{Zub} は**定常状態**を表す統計演算子である．式 (7.41) の $\eta_{\mathrm{loc}}(t)$ は定義式 (7.40) より

$$\eta_{\mathrm{loc}}(t) = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\mathscr{H}_0}\eta_{\mathrm{loc}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\mathscr{H}_0} \tag{7.43}$$

と表される．よって，この時間微分 $\dot{\eta}_{\mathrm{loc}}(t)$ は

$$\dot{\eta}_{\mathrm{loc}}(t) = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\mathscr{H}_0}[\mathscr{H}_0, \eta_{\mathrm{loc}}]\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}t}{\hbar}\mathscr{H}_0} \tag{7.44}$$

となり，交換関係 $[\mathscr{H}_0, \eta_{\mathrm{loc}}]$ を通して，熱流の演算子

$$\boldsymbol{J}_H = \int \dot{x}h(x)dx \tag{7.45}$$

を含むようになる．すなわち，部分積分を利用して

$$\eta_{\mathrm{loc}} \equiv -\int \beta(x)h(x)dx - \Phi = -\beta\mathscr{H}_0 + \int xh(x)\boldsymbol{\nabla}\beta(x)dx + (\text{定数})$$
$$\equiv -\beta(\mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A}_H\cdot\boldsymbol{E}_T) + (\text{定数}) \tag{7.46}$$

となる．ただし，

$$\boldsymbol{A}_H = \int xh(x)dx, \quad \boldsymbol{E}_T = \frac{1}{\beta}\boldsymbol{\nabla}\beta(x)\ (= \text{一定と仮定}), \tag{7.47}$$

および，**局所エネルギー** $h(x)$ は粒子の運動量の関数であり，

$$\boldsymbol{\nabla}(\beta(x)h(x)) = h(x)\boldsymbol{\nabla}\beta(x) \tag{7.48}$$

とみなし，β は $\beta(x)$ の代表値（または平均値）である．よって，式 (7.46) より，

$$\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{H}_0, \eta_{\mathrm{loc}}] = \frac{\mathrm{i}\beta}{\hbar}[\mathscr{H}_0, \boldsymbol{A}_H]\cdot\boldsymbol{E} = -\beta\dot{\boldsymbol{A}}_H\cdot\boldsymbol{E}_T \equiv -\beta\boldsymbol{J}_H\cdot\boldsymbol{E}_T \tag{7.49}$$

となり，定常な熱伝導を記述するズバーレフの「非平衡統計演算子」は

$$\rho_{\mathrm{Zub}} = \mathrm{e}^{\eta_{\mathrm{loc}}+\beta\int_{-\infty}^{0}\mathrm{e}^{\varepsilon t}\boldsymbol{J}_H(t)\cdot\boldsymbol{E}_T dt} \tag{7.50}$$

と表される．こうして，ズバーレフ理論を用いると熱流 $\langle \boldsymbol{J}_H(t) \rangle$ を統計力学的にミクロに求めることができる．

7.2.2 久保理論とズバーレフ理論との関係

6.2 節で詳しく説明した通り，熱伝導に対する久保の線形応答理論[1)]の密度行列 $\rho_{\mathrm{Kubo}}(t)$ は次式で与えられる：

$$\rho_{\mathrm{Kubo}}(t) = \rho_{\mathrm{eq}} \int_{-\infty}^{0} dt \mathrm{e}^{\varepsilon t} \int_{0}^{\beta} d\lambda \boldsymbol{J}_H(t - \mathrm{i}\hbar\lambda) \boldsymbol{E}_T. \tag{7.51}$$

ただし，ρ_{eq} は平衡分布である：

$$\rho_{\mathrm{eq}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0}}{\mathrm{Tr}\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0}}. \tag{7.52}$$

式 (7.50) と式 (7.52) とを比較すると，式 (7.46) の η_{loc} の中の $\beta \boldsymbol{A}_H \cdot \boldsymbol{E}_T$ の項を除けば，外場 $\boldsymbol{E}_T$ の 1 次までは一致していることがわかる（以下の公式 (7.53) を用いる）．しかも，ρ_{Zub} にある余分な項 $\beta \boldsymbol{A}_H \cdot \boldsymbol{E}$ は熱流 $\langle \boldsymbol{J}_H \rangle$ の計算には，少なくとも外場の 1 次までの範囲では効かないことがわかる．すなわち，量子解析における量子テイラー展開公式[4, 7, 10)]

$$\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0 + \beta \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{F}} = \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0} + \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_0} \int_0^{\beta} \boldsymbol{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda) d\lambda \cdot \boldsymbol{F} + \cdots \tag{7.53}$$

および

$$A(-\mathrm{i}\hbar\lambda) = \mathrm{e}^{\lambda \mathscr{H}_0} A \mathrm{e}^{-\lambda \mathscr{H}_0} \tag{7.54}$$

を用いると，流れの演算子 $\boldsymbol{J} = \dot{\boldsymbol{A}}$ に対して，

$$\left\langle \dot{\boldsymbol{A}} \int_0^{\beta} \boldsymbol{A}(-\mathrm{i}\hbar\lambda) d\lambda \right\rangle_0 \propto \int_0^{\beta} d\lambda\, \mathrm{Tr} \left([\mathscr{H}_0, \boldsymbol{A}] \mathrm{e}^{-(\beta-\lambda)\mathscr{H}_0} \boldsymbol{A} \mathrm{e}^{-\lambda \mathscr{H}_0} \right) = 0 \tag{7.55}$$

となる．

こうして，ズバーレフ理論は久保理論の拡張になっていることがわかる．それは熱伝導への拡張であると同時に非線形応答への指数形の拡張になっている．ここで，ズバーレフ理論を詳しく紹介したのは，筆者はこの後者の指数形の定式化に着目してこれから解説する**散逸ダイナミクス**のカノニカル理論[14)]を思いついたからである．

7.2.3 散逸ダイナミクスのカノニカル理論とは？

前項までの議論からわかる通り，ズバーレフ理論では，ある種のくり込まれた非線形の流れが記述できる．しかし，エントロピー生成は正しく記述できない．なぜなら，外場の 1 次までは正しく取り入れられているが，2 次以上は近

似であるからである．前節で説明した通り，エントロピー生成は，状態の対称成分で記述される．したがって，最低次でも，密度行列の外場に関する 2 次まで正しく取り込まなければならない．

一般に，次のような指数形の密度行列を考える：

$$\rho(t) = \mathrm{e}^{\eta(t)}. \tag{7.56}$$

この式のいわゆるエントロピー関数 $\eta(t)$ を適当に決めて，流れもエントロピー生成も，少なくとも，外場の最低次（それぞれ 1 次と 2 次まで）では，共に正しく記述できるようにする．しかも，初期のカノニカル分布から時刻 $t=\infty$ における定常分布までの散逸過程をできる限り簡単な形で外そうとする理論（これを**散逸ダイナミクスのカノニカル理論**と呼ぶことにする）を作りたい．すなわち，次の 3 つの要件をみたす理論を構成する[14)]：

(i) 流れ，または緩和を記述できる，
(ii) 不可逆性の本質であるエントロピー生成を記述する，
(iii) 指数形 (7.56) で非平衡の状態分布を表現する．指数の肩の関数 $\eta(t)$ は，次の方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\eta(t) = [\mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1(t), \eta(t)] \tag{7.57}$$

の解として決まる（密度行列 $\rho(t)$ と同形のフォン・ノイマン方程式を $\eta(t)$ もみたすことが量子解析で示される[10)]）．

さて，式 (7.57) の解を外場の項 $\mathscr{H}_1(t)$ で次のように展開する：

$$\eta(t) = \eta_0 + \eta_1(t) + \eta_2(t) + \cdots . \tag{7.58}$$

上のカノニカル理論の 3 つの要件をみたすには，式 (7.58) で 2 次の項 $\eta_2(t)$ まで正しく求めればよい．すなわち，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\eta_1(t) = [\mathscr{H}_0, \eta_1(t)] + [\mathscr{H}_1(t), \eta_0] \tag{7.59}$$

および，

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\eta_2(t) = [\mathscr{H}_0, \eta_2(t)] + [\mathscr{H}_1(t), \eta_1(t)] \tag{7.60}$$

の連立方程式の解 $\eta_1(t)$ と $\eta_2(t)$ を初期条件 $\eta_1(t_0) = \eta_2(t_0) = 0$ の下で求める．$\eta_1(t)$ は前節の式 (7.6) と同形の次式で与えられる：

$$\eta_1(t) = \int_{t_0}^{t} U_0(t-s)\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathscr{H}_1(s), \eta_0]U_0^\dagger(t-s)ds\,;\ U_0(t) = \mathrm{e}^{\frac{t}{\mathrm{i}\hbar}\mathscr{H}_0}. \tag{7.61}$$

また，この $\eta_1(t)$ を用いて，$\eta_2(t)$ は

$$\eta_2(t) = \int_{t_0}^{t} U_0(t-s)\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathscr{H}_1(s), \eta_1(s)]U_0^\dagger(t-s)ds \tag{7.62}$$

と与えられる．ただし，η_0 は規格化定数を別にすれば，

$$\eta_0 = -\beta \mathscr{H}_0 \tag{7.63}$$

で与えられる．こうして，指数形の密度行列 (7.56) が求まる．このカノニカル理論は次節で述べるように，いろいろな興味深い特徴を持っている．

7.2.4 久保理論およびズバーレフ理論と新理論との関係

(i) 新理論とエントロピー生成

密度行列 $\rho(t)$ が指数形 (7.56) で表されている点では，新理論はズバーレフ理論の拡張になっている．しかし，両者の本質的な違いは新理論がエントロピー生成に効く対称成分を少なくとも外場の 2 次までは正しく取り込んでいることである．したがって，久保理論の拡張になっているズバーレフ理論でも，流れは高次まで取り扱えるがエントロピー生成が第 1 原理的に導けなかった欠点が新理論では取り除かれる．すなわち，この新しいカノニカル理論では，流れだけでなく，不可逆性の本質であるエントロピー生成も記述できる．もちろん，流れの 1 次までに限定するのであれば，流れは，久保公式で求め，エントロピー生成は，前節で説明した通り，密度行列 $\rho(t)$ を外場で直接展開した式

$$\rho(t) = \rho_0 + \rho_1(t) + \rho_2(t) + \cdots \tag{7.64}$$

の 2 次の項 $\rho_2(t)$ から求めるのが手っ取り早い[14]．

(ii) ファン・カンペン・久保の示量性の仮説[11, 12]

平衡系の熱力学的関数，例えば，エネルギー，自由エネルギーやエントロピーなどは，体系のサイズ Ω（粒子数や体積）に比例するという示量性を持っている．

非平衡系でも，式 (7.56) の $\eta(t)$ が体系のサイズ Ω に比例するという「示量性の仮説」が，ファン・カンペン（van Kampen）[11]や久保ら[12]によって提唱された．この仮説は，初期時刻にこの仮説が成り立っていれば（初期分布が平衡分布であれば成り立つ)，相互作用が短距離力であるという条件の下に一般に正しいことが筆者によって証明されている[13]．

上に説明した散逸ダイナミクスのカノニカル理論で与えられる式 (7.61) の $\eta_1(t)$ や式 (7.62) の $\eta_2(t)$ の中の $[\mathscr{H}_1(s), \eta_0]$ や $[\mathscr{H}_1(s), \eta_1(t)]$ が上の筆者の証明した条件（すなわち，相互作用が短距離力であること）の下では，示量的であることが容易にわかる．したがって $\eta_1(t)$ や $\eta_2(t)$ も示量的である．この意味でも $\eta(t)$ をエントロピー関数（演算子）と呼ぶにふさわしい．

(iii) 現象（流れ）のミクロな記述と本質（不可逆性）の統計力学的記述

以上説明したことをまとめると，図 7.1 のようになる．すなわち，新理論は久保公式およびズバーレフ理論による流れの効果だけでなく，**不可逆性**の本質である**エントロピー生成**を導く**ゆらぎの対称成分**を記述する．標語的に言えば，

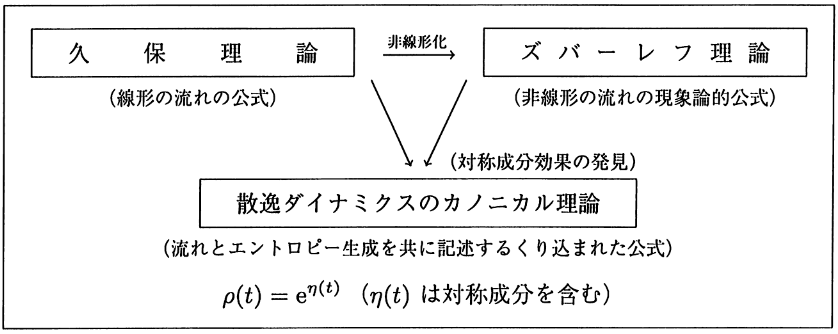


図 7.1　久保理論，ズバーレフ理論およびエントロピー生成を記述する新理論との関係図.

散逸輸送理論では，

現象の記述と本質の記述が異なる！

もう一度まとめると次のようになる：

$\rho_{\text{反対称}}(t) \longrightarrow$ 流れという現象を記述，

$\rho_{\text{対称}}(t) \longrightarrow$ 不可逆という本質を記述.

7.2.5　平衡系のカノニカル理論と散逸ダイナミクスの新理論との相似性と相違

ここでは，静磁場と静電場に対する平衡・非平衡統計力学的取扱いの違いについて議論する.

静磁場 H 中にある磁気モーメント $\boldsymbol{M}$ の振舞いは，ハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{M} \cdot \boldsymbol{H} \tag{7.65}$$

に対するカノニカル分布

$$\rho_{\mathrm{eq}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{Z(\beta)}\,;\ Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}} \tag{7.66}$$

を用いて，平衡統計力学の研究対象となる．この場合，磁気モーメント $\boldsymbol{M}$ は粒子の磁気モーメント $\{\boldsymbol{m}_j\}$ の総和で表され，各粒子の空間座標 $\{\boldsymbol{r}_j\}$ をあらわには含まない．したがって，これは有界な演算子である.

それに対して，静電場 $\boldsymbol{E}$ 中の荷電粒子（電荷 e）の振舞いは，ハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{E}\,;\ \boldsymbol{A} = e\sum_j \boldsymbol{r}_j \tag{7.67}$$

に対する非平衡統計力学の研究対象となり，フォン・ノイマン方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathscr{H}, \rho(t)] \tag{7.68}$$

の解を用いて，この系の輸送現象を取り扱わなければならないことはすでに詳しく説明してきた通りである．一定の温度差がある場合も，前節で説明した通り，式 (7.67) と同様に熱界 $\boldsymbol{E}_T$ 中の熱流として非平衡統計力学的扱いとなる（ここで，式 (7.67) の $\boldsymbol{A}$ は非有界な演算子である）．

この違いはどこから現れるのか．それは，モノポール（磁気単極子）が存在しないという前提の下に扱っているからである[7]．もし，モノポールがあれば，その磁化の強さを μ として，磁場 $\boldsymbol{H}$ 中のモノポール集団の振舞いは，式 (7.67) と同様なハミルトニアン

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A}_M \cdot \boldsymbol{H}\,;\ \boldsymbol{A}_M = \mu \sum \boldsymbol{r}_j \tag{7.69}$$

に対する**磁気輸送現象**として記述されることになる．この場合も $\boldsymbol{A}_M$ は非有界な演算子である．

逆に，原子核の周りに束縛された電子のように，分子を構成しており，格子に固定された分子集団に静電場 $\boldsymbol{E}$ がかけられた場合は，分極率などを求める平衡統計力学の取扱いとなる．

このように，ハミルトニアンは，外力 $\boldsymbol{F}$ に対する共役な演算子 $\boldsymbol{A}$ を用いて，一般に

$$\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{F} \tag{7.70}$$

の形をしており皆類似している．演算子 $\boldsymbol{A}$ が式 (7.67) や (7.69) のように，非有界な座標 $\{\boldsymbol{r}_j\}$ を含んでいてその微分 $\{\dot{\boldsymbol{r}}_j\}$ が粒子 $\{j\}$ の速度 $\{\boldsymbol{v}_j\}$ になっている場合には，輸送現象がそのハミルトニアンによって扱えることになる．式 (7.65) のように，座標をあらわに含まず，微分が速度にならない場合には，輸送現象は記述できない．

7.2.1 項でも解説した通り，ズバーレフの輸送係数の公式を現象論的に導くには，非有界な座標をあらわに含んだハミルトニアン $\mathscr{H}$ を用いた「**局所平衡分布**」

$$\rho_{\mathrm{loc}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}} \tag{7.71}$$

は理論の出発点としては役立つ．もちろんよく知られているように，この「局所平衡分布」では，エントロピー生成はおろか，流れさえも記述できない（補遺参照）．

要するに，静電場や熱界などの外力の入ったハミルトニアンの「カノニカル分布」は非平衡系への「橋渡し」の役割を果たしているが，流れや散逸などの非平衡現象を記述することはできない．この意味で，前述したように，「**局所平衡**」または「**準平衡**」を表すに過ぎない[4]．

本章では，ズバーレフ理論とそれにヒントを得て構築した「散逸ダイナミクスのカノニカル理論」の概要を説明した．次章ではさらに，この理論の発展・応用について解説する．

補遺：局所平衡分布 ρ_{loc} における流れ零（$j = \langle \dot{A} \rangle = 0$）の証明

電界や熱界の入ったハミルトニアン (7.70) に対する局所平衡分布 (7.71)，すなわち ρ_{loc} における流れ $\boldsymbol{J} = \dot{\boldsymbol{A}}$ の期待値 $\boldsymbol{j} = \langle \dot{\boldsymbol{A}} \rangle$ は恒等的に零になることを確かめる．

まず，ρ_{loc} を $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 - \boldsymbol{A} \cdot \boldsymbol{F}$ の巾乗にテイラー展開する．一方，流れの演算子 $\boldsymbol{j} = \dot{\boldsymbol{A}}$ は，

$$\dot{\boldsymbol{A}} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{H}_0, \boldsymbol{A}] = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\mathscr{H}, \boldsymbol{A}]$$

と表される．そこで，$\mathrm{Tr}\, \dot{\boldsymbol{A}} \rho_{\mathrm{loc}} = 0$ を証明するためには，

$$\mathrm{Tr}([\mathscr{H}, \boldsymbol{A}]\mathscr{H}^n) = 0 \tag{7A.1}$$

がすべての正の整数 n に対して成り立つことを示せばよい（$n = 0$ のとき，上式が成立することは明らかである）．

実際に，上式は任意の正数 n に対して

$$\begin{aligned} &\mathrm{Tr}[\mathscr{H}, \boldsymbol{A}]\mathscr{H}^n = \mathrm{Tr}(\mathscr{H}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\mathscr{H})\mathscr{H}^n \\ &= \mathrm{Tr}(\mathscr{H}^{n+1}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{A}\mathscr{H}^{n+1}) = 0 \end{aligned} \tag{7A.2}$$

となり，流れ $\boldsymbol{j} = \dot{\boldsymbol{A}}$ の局所平衡分布に対する期待値は $\langle \dot{\boldsymbol{A}} \rangle = \langle \boldsymbol{j} \rangle = 0$ となる．ここの議論は，ある意味で，7.2.2 項の式 (7.55) の証明の拡張になっている．

このように，局所平衡分布では，エントロピー生成だけでなく，流れの演算子 $\dot{\boldsymbol{A}}$ とハミルトニアン $\mathscr{H}$ では時間反転対称性も異なるので流れも記述できない．

参考文献

1) R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 570 (1957).
2) M. Suzuki, *Physica A* **390**, 1904 (2011); **391**, 1074 (2012) および **392**, 314, 4279 (2013).
3) 私信.
4) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2017 年第 3 刷）.
5) R. Kubo, M. Yokota, S. Nakajima, *J. Phys. Soc. Jpn.* **12**, 1203 (1967).
6) D.N. Zubarev, *Nonequilibrium Statistical Thermodynamics*, Nauka, 1971.
7) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）.
8) A.L. Kuzemsky, *Intern. Modern. Phys. B* **26**, 1250092 (2012).
9) M. Suzuki, *Physica A* **391**, 1074 (2012). 文中の式 (44) の第 2 式の最後の $\boldsymbol{E}_T$ は削除する（印刷の誤り）.
10) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
11) N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North Holland, 1981).
12) R. Kubo, K. Matsuo and K. Kitahara, *J. Stat. Phys.* **9**, 51 (1973).
13) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **53**, 1657 (1975), ibid. **55**, 383 & 1064 (1976): 非平衡分布の示量性のミクロな証明を与えた.
14) M. Suzuki, to be published in *Proc. of the Japan Academy, Ser. B.*

第 8 章
緩和現象のカノニカル理論

温度差に基づく**熱緩和**，磁場の変化による**磁気緩和**など多くの**緩和現象**の中から，最も基本的な熱緩和の問題を「カノニカル理論」の応用・発展の視点でエントロピー変化を中心に議論する．また，散逸ダイナミクスのカノニカル理論では「示量性の仮定」が充足されることを説明する．さらに，定常状態でもエントロピーが増大し得る（すなわち**散逸定常系**となる）メカニズムをわかり易く解説する．最後に，エントロピーが減少する秩序生成との関係にもふれる．

8.1　緩和の現象論

(i) 古典的な緩和現象

一般に，物理的な系が一方的に（不可逆的に）変化することを緩和現象と呼ぶ．**電気回路**の内部抵抗による緩和，スピン系の磁気緩和，温度差による熱緩和など様々な**緩和現象**が知られている[1,2]．

物理的な状態の変化として緩和を捉えるのが本筋であるが，その状態における物理量 Q の期待値 $Q(t)$ の時間変化として扱うのが最も簡単である．線形の範囲では，$Q(t)$ の時間変化が $Q(t)$ そのものに比例して減少する．その減衰定数を λ とすれば，$Q(t)$ は次の微分方程式をみたす：

$$\frac{dQ(t)}{dt} = -\lambda Q(t);\ \lambda > 0. \tag{8.1}$$

もちろん，この解は指数的減衰 $Q(t) = Q(0)\mathrm{e}^{-\lambda t}$ を示す．減衰定数 λ が零（$\lambda = 0$）のときは，式 (8.1) で高次の項 $-\mu Q^n(t)$（n は Q の対称性で決まる 2 以上の自然数）を考慮しなければならない．このとき，系は次のような巾乗で緩和する：

$$Q(t) \sim \frac{1}{t^{1/(n-1)}}. \tag{8.2}$$

これは臨界緩和と呼ばれ，相転移点直上で現れる[2)]．

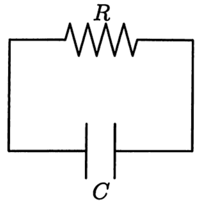


図 8.1　電気容量 C と抵抗 R からなる電気回路[1]．

具体的には，古典的な緩和現象は図 8.1 のような電気回路で実現される[1]．すなわち，電気容量を C，そこに蓄電されている電気量を Q，電気抵抗を R とすると，抵抗を流れる電流 I は，電気容量に蓄積される電荷の符号とは逆の方向に流れるから，

$$IRC = -Q \tag{8.3}$$

の関係が成り立つ．また，電流 I を dQ/dt で置きかえると，式 (8.3) は

$$\frac{dQ}{dt} = -\frac{Q}{RC} \equiv -\frac{Q}{\tau} \tag{8.4}$$

と書けるので，電荷 $Q(t)$ は指数的減衰

$$Q(t) = Q(0)\mathrm{e}^{-t/\tau};\ \tau = RC \tag{8.5}$$

をする（ことはよく知られている）．このとき，回路のエントロピー $S(t)$ の時間変化すなわちエントロピー生成は，単位時間当りのジュール熱（$-IV$）を系の温度 T で割った量

$$\frac{dS(t)}{dt} = -\frac{IV}{T} = \frac{Q^2(t)}{RC^2T} = \frac{Q^2(0)}{RC^2T}\mathrm{e}^{-2t/\tau} > 0 \tag{8.6}$$

で与えられる[1]．

(ii) 量子的な緩和現象（最も簡単な例）

第 1 原理的に量子系の緩和現象を扱うためには，系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ の他に，それに比べてはるかに大きな熱浴のハミルトニアン $\mathscr{H}_\mathrm{r}$ および系との相互作用 $\mathscr{H}_\mathrm{int}$ を導入し，密度行列 $\rho(t)$ に対するフォン・ノイマン方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = [\mathscr{H} + \mathscr{H}_\mathrm{int} + \mathscr{H}_\mathrm{r}, \rho(t)] \tag{8.7}$$

から出発し，熱浴の自由度を消去して，着目する系のみの密度行列を求めなければならない．しかし，これは大変面倒なので[3]，ここでは，次のような現象論的な式

$$\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\mathscr{H}, \rho(t)] - \lambda(\rho(t) - \rho_\mathrm{f}) \tag{8.8}$$

から出発することにする[2]．ここで，ρ_f は終状態の密度行列で時間に依らないとする（ここでは，リミットサイクルやカオスのような複雑系は考えないことにする）．明らかに，上の式 (8.8) には最初から緩和の効果が取り入れられているので，ハミルトニアン $\mathscr{H}$ を無視して解を求めると，それは

$$\rho(t) = (\rho(0) - \rho_{\mathrm{f}})\mathrm{e}^{-\lambda t} + \rho_{\mathrm{f}} \tag{8.9}$$

の形となり，指数形の緩和を記述している．任意の物理演算子 Q の，時刻 t における系の期待値 $\langle Q \rangle_t$ は

$$\langle Q \rangle_t = \mathrm{Tr}\, Q\rho(t) = \langle Q \rangle_0 \mathrm{e}^{-\lambda t} + (1 - \mathrm{e}^{-\lambda t})\langle Q \rangle_{\mathrm{f}} \tag{8.10}$$

と与えられ，古典的な取扱い (i) と対応している．

もし，ここで，初期の密度行列 $\rho(0)$ も終状態の密度行列 ρ_{f} も系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ のみで表される場合には，式 (8.9) で与えられる $\rho(t)$ は $\mathscr{H}$ と可換であるからフォン・ノイマン方程式 (8.8) の右辺の第 1 項は効かないので，式 (8.9) の $\rho(t)$ はもとのフォン・ノイマン方程式 (8.8) の厳密解となる．

特に，$\rho(0)$ も ρ_{f} も共にカノニカル分布

$$\rho(0) = \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{\mathrm{i}}\mathscr{H}}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta_{\mathrm{i}}\mathscr{H}}}, \text{ および } \rho_{\mathrm{f}} = \frac{\mathrm{e}^{-\beta_{\mathrm{f}}\mathscr{H}}}{\mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta_{\mathrm{f}}\mathscr{H}}} \tag{8.11}$$

で与えられる場合は興味深い．これは，（逆）温度 β_{i} で記述される平衡状態から，β_{f} で記述される平衡状態への熱緩和現象を記述するプロトタイプになっている．後で詳しく議論するように，このように簡単な非平衡系でも β_{i} と β_{f} の大小関係によって，系のエントロピー変化は正（エントロピー生成），負（エントロピー減少）のどちらにもなり得る．これは大変注目すべきことである．

上の議論では，ρ_{f} だけでなく $\rho(0)$ は式 (8.11) のように仮定したが，$\rho(0)$ が系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ と可換でない（$[\mathscr{H}, \rho(0)] \neq 0$ の）場合でも，フォン・ノイマン方程式 (8.8) の解は一般に

$$\rho(t) = (1 - \mathrm{e}^{-\lambda t})\rho_{\mathrm{f}} + \mathrm{e}^{-\lambda t}\left(\mathrm{e}^{\frac{t\mathscr{H}}{\mathrm{i}\hbar}}\rho_{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\frac{t\mathscr{H}}{\mathrm{i}\hbar}}\right) \tag{8.12}$$

と与えられる．上の式の右辺の第 2 項は，ρ_{i} を $\rho_{\mathrm{i}} = \mathrm{e}^{\eta_{\mathrm{i}}}$ の形に表せば，$\mathrm{e}^{-\lambda t}\mathrm{e}^{\eta_{\mathrm{i}}(t)}$ の形に変形できる．ただし，

$$\eta_{\mathrm{i}}(t) = \mathrm{e}^{\frac{t\mathscr{H}}{\mathrm{i}\hbar}}\eta_{\mathrm{i}}\mathrm{e}^{-\frac{t\mathscr{H}}{\mathrm{i}\hbar}} \tag{8.13}$$

である．こうして，結局，式 (8.12) の $\rho(t)$ は 2 つの「一般化されたカノニカル分布」の線形結合で表せる：

$$\rho(t) = \mathrm{e}^{-\lambda t}\rho_{\mathrm{i}}(t) + (1 - \mathrm{e}^{-\lambda t})\rho_{\mathrm{f}};\ \rho_{\mathrm{i}}(t) = \mathrm{e}^{\eta_{\mathrm{i}}(t)}. \tag{8.14}$$

ただし，$\rho_{\mathrm{i}}(t)$ および ρ_{f} はそれぞれ規格化されている．

8.2 散逸ダイナミクスのカノニカル理論と示量性の仮定

前章で定式化した「散逸ダイナミクスのカノニカル理論」では，密度行列 $\rho(t)$ をエントロピー関数（演算子）$\eta(t)$ を用いて

$$\rho(t) = \mathrm{e}^{\eta(t)} \tag{8.15}$$

の指数形で表し，流れまたは緩和を記述する．しかもエントロピー変化も本質的には表現し得るようにする．また，エントロピー演算子 $\eta(t)$ は，古典的な対応でみると，ある種の「示量性」すなわち，系のサイズ Ω に比例するという性質を持つ（示量性の仮定）．

この視点で前節の緩和理論の解 (8.9) を見ると，一つの指数演算子ではなく，次のような「混合カノニカル集団」となっていることがわかる：

$$\rho(t) = a(t)\rho_1(t) + b(t)\rho_2(t);\ a(t)+b(t) = 1 \text{ および } \mathrm{Tr}\,\rho_\mathrm{i}(t) = 1. \tag{8.16}$$

この「混合カノニカル集団」でも「示量性の仮定」が成り立つことは容易に確かめられる．数学的には，著者の量子解析[4,5]を用いて，1 つの指数関数（演算子）にまとめると $\eta(t)$ はハミルトニアン $\mathscr{H}$ の高次まですべてキュムラント形になることが確かめられるので，示量性の仮定が成り立つことがわかる．物理的には，任意の物理量 Q の $\rho(t)$ に関する期待値 $\langle Q\rangle_t = \mathrm{Tr}\,Q\rho(t)$ が系のサイズ Ω に比例することからも容易に示量性が確かめられる．

8.3 緩和とエントロピー生成

緩和の典型的な例として前節で説明した「熱緩和」におけるエントロピー $S(t)$ の時間変化を議論する．この問題での系のエントロピー $S(t)$ は内部エネルギー $E(t)$ と系の温度 $T(t)$ を用いて次式で定義される：

$$S(t) = S(0) + \int_0^t \frac{dE(s)}{T(s)} = S(0) + \int_0^t \frac{\frac{dE(s)}{ds}}{T(s)} ds. \tag{8.17}$$

ただし，内部エネルギー $E(t)$ は系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ の期待値 $\langle\mathscr{H}\rangle_t$ で与えられるから，その時間微分は，現象論的な式 (8.8) を用いて

$$\begin{aligned} \frac{dE(t)}{dt} &= \frac{d}{dt}\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}\rho(t) = \mathrm{Tr}\,\mathscr{H}\frac{\partial\rho(t)}{\partial t} \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}[\mathscr{H},\rho(t)] - \lambda\,\mathrm{Tr}\,\mathscr{H}(\rho(t) - \rho_\mathrm{f}) \\ &= -\lambda(\langle\mathscr{H}\rangle_t - \langle\mathscr{H}\rangle_\mathrm{f}) \end{aligned} \tag{8.18}$$

となり，エントロピー変化は，式 (8.17) の時間微分より

$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{1}{T(t)}\frac{dE(t)}{dt} = \frac{\lambda}{T(t)}(\langle\mathscr{H}\rangle_\mathrm{f} - \langle\mathscr{H}\rangle_t) \tag{8.19}$$

と求まる．したがって，初期の温度 $T(0)$ が終状態の温度 T_f より低く，外界から熱を受けとって系の温度 $T(t)$ が上昇する通常の「熱緩和」では不等式 $\langle\mathscr{H}\rangle_\mathrm{f} > \langle\mathscr{H}\rangle_t$ が成り立つから

$$\frac{dS(t)}{dt} > 0 \tag{8.20}$$

となる．すなわち，エントロピーが生成され，散逸がある．一方，熱浴は温度 T_f に固定されている（熱浴はその温度変化が無視できるくらいに大きいと仮定している）ので，熱浴のエントロピー $S_\mathrm{r}(t)$ は

$$S_{\mathrm{r}}(t) = S_{\mathrm{r}}(0) - \int_0^t \frac{dE(s)}{T_{\mathrm{f}}} = S_{\mathrm{r}}(0) - \frac{1}{T_{\mathrm{f}}}(E(t) - E(0)) \tag{8.21}$$

で与えられる．したがって，その時間変化は

$$\frac{dS_{\mathrm{r}}(t)}{dt} = -\frac{1}{T_{\mathrm{f}}}\frac{dE(t)}{dt} = -\frac{\lambda}{T_{\mathrm{f}}}\left(\langle\mathscr{H}\rangle_{\mathrm{f}} - \langle\mathscr{H}\rangle_t\right) < 0 \tag{8.22}$$

と求まる．これは負であるが，着目している系と熱浴とを合わせた全系のエントロピー $S_{\mathrm{tot}}(t)$ の時間変化は，式 (8.19) と (8.22) より

$$\frac{dS_{\mathrm{tot}}(t)}{dt} = \lambda(\langle\mathscr{H}\rangle_{\mathrm{f}} - \langle\mathscr{H}\rangle_t)\left(\frac{1}{T(t)} - \frac{1}{T_{\mathrm{f}}}\right) > 0 \tag{8.23}$$

となり，当然ながら，常に全エントロピーは増大する．後で議論するように，$T(0) > T(t) > T_{\mathrm{f}}$ という場合でも，$\langle\mathscr{H}\rangle_t > \langle\mathscr{H}\rangle_{\mathrm{f}}$ となるので，不等式 (8.23) が成り立つ．ただし，この場合は，2 つの不等式 (8.20) と (8.22) はそれぞれ逆になる．こんな自明なことをここで詳しく説明したのには訳がある．その訳は次節で説明する．

8.4 「定常状態」でもエントロピーは増大する!?

(i) 誤解を与えるプリゴジンの「エントロピー流束」

プリゴジンの本では[6)]，図 8.2 (a) のように，「エントロピー流束 $d_{\mathrm{e}}S$」という言葉を使い，あたかもエントロピーが（エネルギーのような）保存量であるかの如く，「開放定常系では，内部のエントロピー生成 $d_{\mathrm{i}}S$ と外部からのエントロピー流 $d_{\mathrm{e}}S$ との和が

$$dS = d_{\mathrm{i}}S + d_{\mathrm{e}}S = 0 \tag{8.24}$$

となり，$d_{\mathrm{e}}S = -d_{\mathrm{i}}S < 0$ ならば，この開放定常系は維持される」と主張している[6)]．しかし，そもそも，エントロピーは保存量ではないので，式 (8.24) には何の根拠もない．

(ii) 定常系でエントロピーが増大するメカニズム

筆者の *Physica A* の第 2 論文[7)]で詳しく説明した通り，電流などが一定に流れている定常輸送現象でもエントロピーは増大し続けているのである．外部か

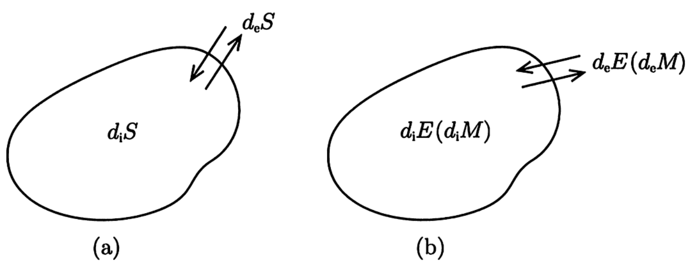


図 8.2　(a) 開放系におけるエントロピー流束[6)]（!?）（これは誤解を与える図である）．
(b) 正しくは，外界とエネルギー E または物質 M のやりとりが行われる．

らのエントロピー流束によってプリゴジンの式 (8.24) のようになっているわけではない．

定常系におけるエントロピー増大のメカニズムは，前節の緩和現象におけるエントロピー増大の議論を踏まえて説明するとわかり易い．すなわち，式 (8.17) と (8.21) からわかる通り，同じ熱エネルギーのやり取りがあっても，やり取りする側の温度によってエントロピー変化量は異なる．したがって，図 8.2 (a) に示すプリゴジンのエントロピー流束を用いる説明は誤解を招くので適当ではないと思われる．

改めて，定常系でもエントロピーが増大するメカニズムを説明すると次のようになる[7]．わかり易い例として，抵抗 R の両端に一定電圧 V がかかり電流 I が流れる非平衡系を考える．

まず初めに，電源と抵抗を合わせたものを孤立系として扱うと，話は簡単である．ジュール熱によって抵抗体の温度は時間と共に上昇する．その温度を $T(t)$ とする．温度の上昇と共に抵抗も大きくなる．それを $R(t)$ とする．時刻 $t=0$ から t までに，この系で生成されるエントロピー $\varDelta S(t)$ は

$$\varDelta S(t) = -\int_0^t \frac{VdI(s)}{T(s)} = V^2 \int_0^t \frac{1}{T(s)R^2(s)} \frac{dR(s)}{ds} ds \tag{8.25}$$

となる．ただし，オームの法則 $I(s) = V/R(s)$ を用いた．要するに，ジュール熱発生量をその時々の温度で割って足し合わせたものが全体のエントロピー生成となっている．これはごく当り前のことでわかり易い．

問題は，開放定常系として扱う場合のエントロピーの変化の取扱い方である．上で扱った孤立系では，ジュール熱によって系の温度が上昇してしまうので，定常状態を保つためには発生した熱を外に取り出さねばならない．「ある種の熱緩和」をさせる必要がある．この操作を密度行列を用いて行うには，特別の工夫が要る[7]．すなわち，密度行列 $\rho(t)$ を外場に関して対称な成分 $\rho_{\rm s}(t)$ と反対称な成分に分け（$\rho(t) = \rho_{\rm s}(t) + \rho_{\rm a}(t)$），反対称成分 $\rho_{\rm a}(t)$ には系のハミルトニアン $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_1$（外場の部分）に基づく量子力学的変化（もともとのフォン・ノイマン方程式）の他に，次のように緩和項をつけ加える[7]：

$$\frac{\partial \rho_{\rm s}(t)}{\partial t} = \frac{1}{{\rm i}\hbar}\left([\mathscr{H}_0, \rho_{\rm s}(t)] + [\mathscr{H}_1, \rho_{\rm a}(t)]\right) - \varepsilon_{\rm r}(\rho_{\rm s}(t) - \rho_0). \tag{8.26}$$

ここで，緩和定数 $\varepsilon_{\rm r}$ の逆数 $\tau_{\rm r} = 1/\varepsilon_{\rm r}$ は緩和の速さを表す．有限の緩和時間 $\tau_{\rm r}$ で定常状態を保つためには，系の温度より（かなり，少なくとも有限差のある）低い温度 $T_{\rm r}$ の熱浴を用意して系の熱を系外に取り出さなければならない．まさに，前節のエントロピー変化の話がここで役立つのである．熱浴の温度 $T_{\rm r}$ が系より低い温度であるため，**全系のエントロピーは増大**しながら，着目している系は一定温度の定常状態に保たれるのである．プリゴジンは，ジュール熱が外に取り出される効果を系の側から見たエントロピー流束（そのときの温度は系の温度 T を用いる）と呼んで，「エントロピー変化＝零」によって定常状態を

特徴づけた[6]．これでは，不可逆性（散逸）の本質であるエントロピー生成のメカニズムは理解し難い．やはり，熱浴側のエントロピー増大を考慮した本章の説明[7]のほうが物理的でわかり易いと思う．定常的な熱伝導におけるエントロピー生成のメカニズムについても同様である．これについては次章で詳しく説明する．

8.5 緩和と秩序生成との関係

次章では秩序生成の問題をエントロピー変化の視点で詳しく議論したい．その準備として，緩和と秩序生成との関係にふれておく．8.3 節で説明した「熱緩和」は，もとの系の温度より高い温度の熱浴から熱を受け取り，系が温度上昇する場合であり，系のエントロピーは，当然ながら，増大する．これは通常の熱緩和である．逆に，もとの系の温度より低い温度の熱浴に系が置かれた場合（例えば，水を冷蔵庫に入れた場合），式 (8.19) より

$$\frac{dS(t)}{dt} = \frac{\lambda}{T(t)}\left(\langle\mathscr{H}\rangle_{\mathrm{f}} - \langle\mathscr{H}\rangle_{t}\right) < 0 \tag{8.27}$$

となり，**着目している系のエントロピーは減少する**．系は熱を放出して冷えていき，さらに温度が 0℃ 以下に下がると相転移を起こして氷となる．すなわち秩序生成が起こる．**一般に秩序生成ではエントロピーは減少する**[8]．

このように，一口に「緩和」と言っても，いろいろあり，むしろ，「秩序生成」として別に扱うほうが望ましい．これは次章で扱うことにする．

前章での「非平衡統計力学のカノニカル理論」の話の発展として，本章では緩和現象，特に「熱緩和」を取り上げエントロピー変化の視点から解説した．温度が上昇する通常の緩和ではエントロピーは増大するが，秩序生成が起こる場合にはエントロピーは減少することを具体的に示した．この問題については，次章で「秩序生成のスケーリング理論」[8,9]をエントロピー変化の視点から詳しく説明する．

参考文献

1) イリヤ・プリゴジン，ディリップ・コンデプディ著，妹尾学・岩元和敏訳『現代熱力学—熱機関から散逸構造へ』（朝倉書店，2001）．
2) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
3) U. Weiss, *Quantum Dissipative Systems* (World Scientific, 2012).
4) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2016）．
5) M. Suzuki, *Commun. Math. Phys.* **183**, 339 (1997).
6) G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems* (New York: Wiley, 1977)［小畠陽之助，相沢洋二訳『散逸構造』（岩波書店，1980）］．
7) M. Suzuki, *Physica A* **390**, 1904 (2011); ibid. **391**, 1074 (2012); ibid. **392**, 314 (2013) および ibid. **392**, 4279 (2013).
8) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.**195**, 114 (2012).
9) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77, 477 (1976), および **57**, 380 (1978). また，レビューとしては，M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195–278 (1981) 参照．

第 9 章
秩序生成のカノニカル理論

9.1 アインシュタインのブラウン運動の理論と秩序生成のスケーリング理論

最初に，輸送現象におけるエントロピー生成のメカニズムを直観的に説明するため，アインシュタインのブラウン運動の理論の解説をする．次に秩序生成のスケーリング理論を詳しく解説する．すなわち，ランジュバン方程式に対応するフォッカー・プランク方程式の導出とその代数的な解の表現について説明する．ドリフト項が線形の場合には，その解は 2 つないし 3 つの指数積で与えられることを示し，その指数関数的にくり込まれたノイズの強さを用いると，非線形の秩序生成のスケーリング解（漸近解）が代数的に表現できることを示す．さらに，その漸近解を用いて，秩序生成のエントロピー変化（減少）を論じる．

9.1.1 アインシュタインのブラウン運動の理論にもとづく輸送現象におけるエントロピー生成のメカニズム

前章まで解説してきた輸送現象や緩和現象は，典型的な不可逆現象である[1~5]．7.1 節では，輸送現象におけるエントロピー生成の問題をフォン・ノイマン方程式の解の外力に関する対称性から数理的に論じた．ここでは，アインシュタインのブラウン運動の理論[2,3]を用いてこの問題を物理的に議論する．電気伝導などの輸送現象は，本来量子力学を用いて扱うべきものである[2,3]が，その物理的描像を示すには古典的取扱いのほうがわかり易い．

さて，アインシュタインのブラウン運動の理論では，輸送現象を担っている粒子がそれぞれ独立に媒質からランダムな力 $\eta(t)$ を受けながら運動し摩擦が生じるとする．このブラウン運動をする粒子の速度 $v(t)$ は，その質量を m，摩擦係数を ζ，外力を F とすると，次のランジュバン方程式をみたす[2,3]：

$$m\frac{dv(t)}{dt} = -\zeta v(t) + \eta(t) + F. \tag{9.1}$$

ここで，ランダムな力 $\eta(t)$ は，理想化して（数学的に扱い易くするため），平均が零，相関がデルタ関数 $\delta(t)$ で表される**白色ガウシャンノイズ**とする．すなわち，**ランダム平均** $\langle\cdots\rangle$ に対して，

$$\langle\eta(t)\rangle = 0 \text{ および } \langle\eta(t)\eta(t')\rangle = 2\varepsilon\delta(t-t') \tag{9.2}$$

が成り立ち，$\{\eta(t)\}$ の高次の相関はすべて 2 次の相関に分解される．例えば，4 次の相関 $\langle\eta(t_1)\eta(t_2)\eta(t_3)\eta(t_4)\rangle$ は $\langle\eta(t_1)\eta(t_2)\eta(t_3)\eta(t_4)\rangle = \langle\eta(t_1)\eta(t_2)\rangle\langle\eta(t_3)\eta(t_4)\rangle + \langle\eta(t_1)\eta(t_3)\rangle\langle\eta(t_2)\eta(t_4)\rangle + \langle\eta(t_1)\eta(t_4)\rangle\langle\eta(t_2)\eta(t_3)\rangle$ と分解される[2,3]．こうして，高次相関のランダム平均はすべて求められる．

特に，速度 $v(t)$ の平均 $\bar{v}(t) = \langle v(t)\rangle$ は式 (9.1) より，方程式 $m\frac{d}{dt}\bar{v}(t) = -\zeta\bar{v}(t) + F$ で表される．この方程式の解は，初期条件 $\bar{v}(0) = 0$ のもとで，

$$\bar{v}(t) = \mu F(1 - \mathrm{e}^{-\gamma t});\ \mu = \frac{1}{\zeta} = \frac{1}{m\gamma} \tag{9.3}$$

と与えられる．時刻 $t = \infty$ では，定常状態になり，その定常速度 $v_{\mathrm{st}} = \bar{v}(\infty) = \mu F$ となる．こうして輸送係数 μ が ζ を用いて表されることになる．

ブラウン粒子の運動エネルギーの平均値 $E(t) = \frac{1}{2}m\langle v^2(t)\rangle$ を求めるためには，確率微分方程式であるランジュバン方程式 (9.1) そのものの解を求める必要がある．それは線形微分方程式であるから，その解は標準的な方法で求まり，

$$v(t) = \mathrm{e}^{-\gamma t}\left(\frac{1}{m}\int_0^t \mathrm{e}^{\gamma s}\eta(s)ds + v(0)\right) + \mu F(1 - \mathrm{e}^{-\gamma t}) \tag{9.4}$$

となる．よって，式 (9.2) と $\langle v(0)\eta(s)\rangle = 0$ $(s > 0)$ を用いると，ブラウン粒子の運動エネルギーの平均値は

$$E(t) = \frac{\mu}{\gamma}F^2(1 - \mathrm{e}^{-\gamma t})^2 + \frac{1}{2}\mu\varepsilon + \left(\frac{m}{2}\langle v^2(0)\rangle - \frac{1}{2}\mu\varepsilon\right)\mathrm{e}^{-2\gamma t} \tag{9.5}$$

と求まる．ここで，$t = 0$ までは外力 $F = 0$ のもとで粒子は熱平衡にあると仮定する．その後，外力 F によってブラウン粒子が加速され，$t = \infty$ でその運動エネルギーは式 (9.5) より $E(\infty) = \frac{\mu}{\gamma}F^2 + \frac{1}{2}\mu\varepsilon$ となる．もし，$t \geq 0$ でも外力 $F = 0$ ならば，ブラウン粒子の運動エネルギーの平均は $t \leq 0$ までの値のままになるはずであり，$E(\infty)$ の式で $F = 0$ とした値 $\frac{1}{2}\mu\varepsilon$ と等しくならなければならない．すなわち，$\frac{1}{2}m\langle v^2(0)\rangle = \frac{1}{2}\mu\varepsilon$ が成り立つことになる．このブラウン粒子が $F = 0$ のとき温度 T の熱平衡状態にあるという仮定のもとでは，古典近似の**等分配則** $\frac{1}{2}m\langle v^2(0)\rangle = \frac{1}{2}k_{\mathrm{B}}T$ が成り立つ．こうして，

$$\mu\varepsilon = k_{\mathrm{B}}T,\ \text{すなわち}\ \zeta = \frac{\varepsilon}{k_{\mathrm{B}}T} \tag{9.6}$$

が導かれる．すなわち，摩擦係数 ζ はランダムなゆらぎの強さ ε に比例する．これは正(まさ)しく「**揺動散逸の関係式（定理）**」に他ならない[2,3]．この関係式を用いると，式 (9.5) の右辺の第 3 項は消えて，結局，ブラウン粒子の運動エネル

ギーは $E(t)=\frac{\mu}{\gamma}F^2(1-\mathrm{e}^{-\gamma t})^2+\frac{1}{2}\mu\varepsilon$ となる．その時間微分は

$$\frac{dE(t)}{dt}=\mu F^2(1-\mathrm{e}^{-\gamma t})\mathrm{e}^{-\gamma t} \tag{9.7}$$

のような面白い形になる[3]．すなわち，$t=0$ で零から始まり．途中の時刻 $t_0=\frac{1}{\gamma}\log 2$ で最大値 $E_{\max}=\frac{1}{4}\mu F^2$ をとり再び減少し，$t=\infty$ で零になる[3]．

この運動エネルギーの特徴的な時間変化は，輸送現象のエントロピー生成のメカニズムを以下で説明するのに本質的に重要な意味を持つ．

さて，外力で加速された粒子との衝突による媒質の受け取る熱エネルギーの増加率 $dU(t)/dt$ を，**エネルギー保存則**を用いて求めてみよう．それは，外力の仕事率 $\bar{v}(t)F$ から，$dE(t)/dt$ を差し引いたもので与えられ，

$$\frac{dU(t)}{dt}=\bar{v}(t)F-\frac{dE(t)}{dt}=\mu F^2(1-\mathrm{e}^{-\gamma t})^2 \tag{9.8}$$

となる[3]．

したがって，力 F のもとでのブラウン運動におけるエントロピー生成 σ_S は

$$\sigma_S=\frac{dS(t)}{dt}=\frac{1}{T}\frac{dU(t)}{dt}=\frac{\mu F^2}{T}(1-\mathrm{e}^{-\gamma t})^2 \tag{9.9}$$

で与えられる[3]．

まとめると，外力 F のなす仕事がブラウン粒子を加速させ，その運動エネルギー $E(t)$ を増大させるのに使われ，それがやがてすべて媒質の熱エネルギーに変わることが，上で得られた $E(t)$ の特徴的な時間変化から如実にわかる[3]．

以上の議論は電荷を持った粒子が電界の中で加速する電気伝導についても全く同様に当てはまる．要するに，不可逆的な輸送現象の本質は熱の発生そのものにあるから，定常状態に達する途中も考慮することが大切である[1,3]．

9.1.2　秩序生成のスケーリング理論とエントロピー変化

前章で，緩和現象におけるエントロピー変化の一つとして，単純な温度下降に伴う秩序生成とエントロピー減少にはふれた．ここでは，よりミクロな秩序生成理論にもとづくエントロピー変化の議論をする．

(i) 秩序生成のスケーリング理論とは[6~9]

ミクロの世界から宇宙まで無秩序状態から秩序が形成される仕組みは極めて多岐にわたる．ここでは，それらに普遍的なエントロピー変化の問題に焦点を当てて議論したい．そのために，無秩序からの秩序生成にとって絶対に欠かせない次の 3 つの要件，**不安定性**，**ゆらぎ**，および**非線形性**を兼ね備えた，できる限り単純明快なモデルを扱うことにする．それは，秩序パラメータをたった一つにした次の**非線形ランジュバン方程式**である[6~9]：

$$\frac{dx}{dt}=\gamma x-gx^3+\eta(t);\ \gamma>0,\ g>0. \tag{9.10}$$

ただし，x は系の秩序パラメータを表す（例えば，強磁性体では自発磁化の強さ，

超伝導体ではクーパー対からなる超伝導成分など）．また，g は系の相互作用を平均場近似して簡単化した非線形効果を表すパラメータであり，$\eta(t)$ は前節で説明した白色ガウシャンノイズである．上のランジュバン方程式 (9.10) は，アインシュタインのブラウン運動の式 (9.1) において外力 $F=0$ としたものとよく似ているが，物理的には次に 2 つの点で本質的に異なる：

- 明らかに，線形項の符号が互いに逆である．式 (9.1) は安定系（定常系への移行）を記述するモデルであるが，式 (9.10) で表されるモデル系では $x=0$ が無秩序な**不安定点**になっている．初期条件 $x=0$ から出発しても，系はノイズ項 $\eta(t)$ によって秩序生成へと向かい始める．やがて非線形効果（$-gx^3$ の項の存在）によって安定化した秩序状態（$x \to x_{\mathrm{st}} = \pm(\gamma/g)^{1/2}$）になる[6~9]．
- モデル式 (9.10) では，2 つのパラメータ γ と g は互いに独立である．それに対して，アインシュタインのモデル式 (9.1) では，ランダムな力 $\eta(t)$ を受けて摩擦が生じると捉えるので，2 つは独立でなくなり，揺動散逸の関係式 (9.6) で結ばれている．

(ii) フォッカー・プランク方程式による取扱い

非線形ランジュバン方程式 (9.10) は 3 次の項が入っただけの見かけ上簡単な微分方程式であるが厳密に解くことは困難である．多くの人がいろいろな近似法で解の振舞いを研究している[10]．筆者は，秩序生成の時間領域における本質的な振舞いを漸近的に抽出する「秩序生成のスケーリング理論」を構築し，様々な現象に応用した[6~9]．

その手段として，式 (9.10) を直接扱うのではなく，それと等価な**フォッカー・プランク方程式**

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\left(\alpha(x)P(x,t)\right) + \varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \tag{9.11}$$

を扱うことにする[6~9]．ただし，式 (9.10) に対応して $\alpha(x)=\gamma x - gx^3$ である．分布関数 $P(x,t)$ は時刻 t において $x(t)$ が x の値をとる確率である．すなわち，$P(x,t)=\langle\delta(x(t)-x)\rangle$ と定義される．

フォッカー・プランク方程式の厳密な導出法はいろいろあるが[11]，ここでは次のように極めてわかり易い説明を試みる．すなわち，(a) ノイズ $\eta(t)$ がないときには，式 (9.11) の右辺の第 1 項（**ドリフト項**）が導けること，および (b) $\alpha(x)\equiv 0$ のときには，第 2 項（**拡散項**）が導けることを示すことにする．まず，(a) の $\varepsilon=0$ に対する 1 階の偏微分方程式 (9.11) の特性方程式が $\eta(t)\equiv 0$ に対する式 (9.10) で与えられることから，式 (9.11) の右辺第 1 項のドリフト項は容易に理解できる．次に，(b) の拡散項は，$\alpha(x)\equiv 0$ に対するランジュバン方程式 $\dot{x}(t)=\eta(t)$ を用いて，その分布関数 $P(x,t)$ が $P(x,t)=\langle\delta(x(t)-x)\rangle$ で定義されることを利用する．そこでまず，1 つのサンプルパス $\{\eta(t)\}$ に対する**超関数分布** $\rho(x,t)=\delta(x(t)-x)$ の振舞いを調べる．これは，次の方程式を

みたすことが，$\dot{x}(t)=\eta(t)$ より容易にわかる：

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\rho(x,t) &= \dot{x}(t)\frac{\partial}{\partial x(t)}\delta(x(t)-x) = -\dot{x}(t)\frac{\partial}{\partial x}\delta(x(t)-x) \\ &= -\eta(t)D\rho(x,t);\ D=\frac{\partial}{\partial x}. \end{aligned} \tag{9.12}$$

これは，**久保の確率的リュービュウ方程式**に他ならない[12]．この形式解は

$$\rho(x,t)=\exp\left(-\int_0^t \eta(s)dsD\right)\rho(x,0) \tag{9.13}$$

と与えられる．ドリフト項が存在するときの久保の確率的リュービュウ方程式の解は互いに非可換な演算子を含むので，順序づき指数演算子となり，取扱いが面倒になるため，ここではドリフト項と拡散項とを分けて扱った．

さて，$\{\eta(t)\}$ が白色ガウシャンノイズであるという性質，すなわち，式 (9.2) などを用いると，よく知られているように[2,3]，

$$\begin{aligned}P(x,t)=\langle\rho(x,t)\rangle &= \left\langle \exp\left(-\int_0^t \eta(s)D\right)\right\rangle\langle\rho(x,0)\rangle \\ &= \exp\left(\frac{1}{2}\int_0^t ds\int_0^s ds'\langle\eta(s)\eta(s')\rangle D^2\right)P(x,0) \\ &= \exp\left(\varepsilon t D^2\right)P(x,0) \end{aligned} \tag{9.14}$$

となる．こうして，$P(x,t)$ は次の拡散方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t)=\varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \tag{9.15}$$

をみたす．

以上の議論より，ランジュバン方程式で与えられる系の確率分布はフォッカー・プランク方程式 (9.11) をみたすことがわかる．

(iii) 線形（$\alpha(x)=\gamma x$）の場合の代数的解法[2,3]

まず，ドリフト項が線形，すなわち，$\alpha(x)=\gamma x$ の場合の式 (9.11) の解を，リー代数の方法を用いて求める[2,3]．

この場合のフォッカー・プランク方程式の解は形式的に

$$P(x,t)=\mathrm{e}^{A+B}P(x,0);\ A=-\gamma t\frac{\partial}{\partial x}x, B=\varepsilon t\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{9.16}$$

と書ける．2 つの演算子 A と B とは互いに非可換であるが次の交換関係をみたす：$[A,B]=\alpha B;\ \alpha=2\gamma t$．すなわち，2 つの演算子 A と B は交換関係を通して閉じた **2 次元リー代数**を構成している[2,3]．したがって，指数演算子 e^{A+B} は任意の λ に対して

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{\lambda s(-\alpha)B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{(1-\lambda)s(\alpha)B};\ s(\alpha)=\frac{1-\mathrm{e}^{-\alpha}}{\alpha} \tag{9.17}$$

と厳密に分解できる[2,3]．ここでは，簡単のために $\lambda=0$ に対する公式を用いると，形式解 (9.16) は

$$P(x,t)=\exp\left(-\gamma t\frac{\partial}{\partial x}x\right)\exp\left\{(1-\mathrm{e}^{-2\gamma t})\left(\frac{\varepsilon}{2\gamma}\right)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right\}P(x,0) \tag{9.18}$$

と 2 つの指数演算子で表される．より具体的な表式を求めるには，任意の 2 つの関数 $\gamma(t)$ と $\varepsilon(t)$ に対して成り立つ次の 2 つの公式

$$\exp\left(-\gamma(t)\frac{\partial}{\partial x}x\right)P(x)=\mathrm{e}^{-\gamma(t)}P\left(x\mathrm{e}^{-\gamma(t)}\right), \tag{9.19}$$

および

$$\exp\left(\varepsilon(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x)=(4\pi\varepsilon(t))^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4\varepsilon(t)}\right)P(y)dy \tag{9.20}$$

を用いると，式 (9.18) は次の積分形で与えられる：

$$P(x,t)=\left\{\frac{2\pi\varepsilon(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1)}{\gamma}\right\}^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left\{-\frac{(y-\mathrm{e}^{-\gamma t}x)^2}{2\varepsilon(1-\mathrm{e}^{-2\gamma t})/\gamma}\right\}P(y,0)dy. \tag{9.21}$$

こうして，ドリフト項 $\alpha(x)$ が線形の場合には，代数的取扱いによって，フォッカー・プランク方程式の厳密解が求まることがわかった．

この手法は，後で利用されるように，$\alpha(x)$ が非線形の場合にも極めて教訓的である．それは，ドリフト項と拡散項とが分離されるようにノイズの強さ ε を時間 t でくり込むことが，線形の場合には，可能であるということである：

$$\varepsilon\to\tilde{\varepsilon}(t)=\left(\frac{1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}}{2\gamma t}\right)\varepsilon. \tag{9.22}$$

すなわち，式 (9.17) における $\lambda=0$ の公式を用いてドリフト項と拡散項とを 2 つの指数積で分離して扱う際には，式 (9.22) にしたがって時間と共に有効的なノイズの強さ $\tilde{\varepsilon}(t)$ を小さくする．これは，一つの**手順の分離**である[13)]．

(iv) 秩序生成のスケーリング理論

ここでは，非線形の場合 $\alpha(x)=\gamma x-gx^3$ に対するフォッカー・プランク方程式 (9.11) の漸近解を求める代数的手法を説明する[2,3,6~9,13)]．

いろいろな試行的計算を試みた結果，秩序が生成される時間領域，すなわち，いわゆる**スケーリング極限**

$$\text{sc-}\lim\equiv\lim_{g\varepsilon\to 0}\lim_{\substack{t\to\infty\\ \tau=\text{constant}}}\ ;\ \tau=\frac{g\varepsilon}{\gamma^2}\left(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1\right)\simeq\frac{g\varepsilon}{\gamma^2}\mathrm{e}^{2\gamma t} \tag{9.23}$$

で漸近的に正当化される近似法を見つけた[6)]．その説明には前項の代数的解法を利用するのが一番わかり易い[2,3)]．それは，漸近的な分布として

$$P_{\mathrm{sc}}(x,t)=\exp\left(-t\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x)\right)\exp\left(t\tilde{\varepsilon}(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x,0) \tag{9.24}$$

を用いることである．つまり，線形の場合の厳密な分解公式が非線形（$\alpha(x)=$

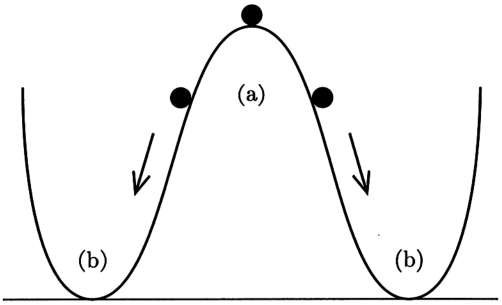


図 9.1 ポテンシャル $\hat{U}(x)$ の不安定平衡点 (a) から安定平衡点 (b) への移行（秩序生成）.

$\gamma x - gx^3$）の場合にも漸近的に良い近似になっている[2,3]．これを**秩序生成のスケーリング理論**と呼ぶ．その妥当性については，次節で議論する．

(v) 秩序生成のエントロピー変化

さて，スケーリング解 (9.24) を用いると，秩序生成におけるエントロピー変化 $\sigma_S(t) = dS(t)/dt$ を求めることができる．

まず，この系の安定平衡分布 $P_{\rm eq}(x)$ は，フォッカー・プランク方程式 (9.11) の平衡解（定常解）

$$P_{\rm eq}(x) = \exp\left(\frac{1}{\varepsilon}\int_0^x \alpha(x)dx\right) = \exp\left(-\frac{\hat{U}(x)}{\varepsilon}\right);\ \hat{U}(x) = -\frac{1}{2}\gamma x^2 + \frac{1}{4}gx^4 \tag{9.25}$$

で与えられる．ここで，$\hat{U}(x)$ は秩序パラメータを駆動する（平均場近似的な）ポテンシャルである．このポテンシャル $\hat{U}(x)$ は図 9.1 の如く 1 つの不安定平衡点と 2 つの安定平衡点を持つ．

ただし，スケーリング解 (9.24) そのものは，秩序が生成され始める時間領域の振舞いを抽出する**漸近解**であって，式 (9.25) の安定平衡解 $P_{\rm eq}(x)$ に厳密に近づくわけではない．それについてはいろいろな工夫が提案されている[6~10]．

秩序生成の時間領域では，この系のエントロピー変化は，式 (9.25) の定常分布とスケーリング解 (9.24) を用いて

$$\begin{aligned}\sigma_S(t) = \frac{dS(t)}{dt} &= -k_{\rm B}\frac{d}{dt}\int_{-\infty}^{\infty} P_{\rm sc}(x,t)\log P_{\rm eq}(x)dx = \frac{k_{\rm B}}{\varepsilon}\frac{d}{dt}\langle\hat{U}(x)\rangle_t \\ &= \frac{k_{\rm B}}{\varepsilon}\frac{d}{dt}\left(-\frac{\gamma}{2}\langle x^2\rangle_t + \frac{1}{4}g\langle x^4\rangle_t\right)\end{aligned} \tag{9.26}$$

と与えられる．ここで $\langle x^{2n}\rangle_t$ は $P_{\rm sc}(x,t)$ を用いて

$$\langle x^{2n}\rangle_t = \int_{-\infty}^{\infty} x^{2n}P_{\rm sc}(x,t)dx \tag{9.27}$$

によって定義される．これらの詳しい求め方については，次節に譲ることにして，本節では興味深い結果のみ示すことにする．**不安定平衡点** $x = 0$ に局在し

た初期分布 $P(x,0)=\delta(x)$ に対するスケーリング解を用いて，エントロピー変化を求めると，面倒な計算の後に，

$$\sigma_S(t)=\frac{dS(t)}{dt}=-\frac{k_{\mathrm{B}}\gamma(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1)}{\sqrt{2\pi}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{x^2\mathrm{e}^{-x^2/2}}{(1+\tau x^2)^3}dx<0 \tag{9.28}$$

という美しい結果が得られる．ただし，τ は**指数的スケーリング時間**

$$\tau=\frac{g\varepsilon}{\gamma^2}(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1)\simeq\frac{g\varepsilon}{\gamma^2}\mathrm{e}^{2\gamma t} \tag{9.29}$$

である[6~9]．

要するに，秩序生成では，スケーリング理論を用いると，エントロピーが減少することが解析的に示される．しかも，その減少速度は**秩序生成のオンセットタイム**[2,3,6~9,14]

$$t_{\mathrm{o}}\simeq\frac{1}{2\gamma}\log\left(\frac{\gamma^2}{g\varepsilon}\right) \tag{9.30}$$

の近傍で最大になることが容易にわかる．これも大変興味深い現象である．

本節では，秩序生成のスケーリング理論に向けての準備的な数理を中心に，その物理的内容のみ解説した．すなわち，秩序が生成される時間領域では，エントロピー減少が激しくなる．秩序生成のエントロピー変化（減少）についての詳しい導出法は次節で述べる．なお，本節で解説したブラウン運動における熱発生とエントロピー生成の機構は，最近話題の「確率的熱力学」のわかり易い例となっている[15]．

9.2 秩序生成の数理的取り扱い

前節では，秩序生成のエントロピー変化（減少）という物理的結果に重点を置いて解説し，フォッカー・プランク方程式の導出以外の数理的取扱いは保留した．そこで本節では，少し数理的な内容も多く盛り込む．

まず，指数微分演算子の代数的構造に着目し，秩序生成の時間領域で妥当なスケーリング解を解析的に求める．次にそれを用いて，秩序生成とゆらぎの急激な増大という普遍的な現象やノイズ，非線形性および初期ゆらぎとの絡み合いなどの物理的特徴を議論する．最後に，この指数的時間のスケーリング理論の妥当性を摂動展開のボレル和の方法を用いて示す．

9.2.1 指数微分演算子とあらわな（積分）表示

この節では，微分演算子を指数の肩にのせた，いわゆる**指数微分演算子**の積分表示などのあらわな表式を詳しく説明する．

(i) 平衡移動の演算子

よく知られているように，微分可能な関数 $f(x)$ に対して，次の公式が成り

立つ：

$$\mathrm{e}^{aD}f(x) = f(x+a);\ D = \frac{d}{dx}. \tag{9.31}$$

上式の左辺の指数微分演算子 e^{aD} を a で展開すると，それは，右辺の関数 $f(x+a)$ の a に関するテイラー展開そのものになっているから，式 (9.31) はほとんど自明な公式である．いずれにしても，無限回の微分を含む操作が，関数 $f(x)$ を有限の量 a だけ平衡移動（大域的変換）させるということは興味深いことである[16)]．ところで，後の参考のために，別解法の 1 つにふれておく．ここでは，$D = \frac{\partial}{\partial x}$ として，

$$g(x,a) = \mathrm{e}^{aD}f(x) \quad \text{および} \quad h(x,a) = f(x+a) \tag{9.32}$$

とおき，これらを，パラメータ a で微分すると，$g(x,a)$ と $h(x,a)$ は初期条件まで含めて全く同じ偏微分方程式をみたすことがわかる：

$$\frac{\partial}{\partial a}g(x,a) = Dg(x,a);\ g(x,0) = f(x) \tag{9.33a}$$

および

$$\frac{\partial}{\partial a}h(x,a) = Dh(x,a);\ h(x,0) = f(x). \tag{9.33b}$$

したがって，$g(x,a) = h(x,a)$ が示され，式 (9.31) が導かれる（これは，$a = \pm vt$ とおけば，速さ v の波動方程式の独立な 2 つの解になっている）．

(ii) ドリフト演算子の表示公式

任意の関数 $\alpha(x)$ に対する「ドリフト演算子」$\exp(-tD\alpha(x))$ に対して，次の公式が成り立つ[7,8)]：

$$\mathrm{e}^{-tD\alpha(x)}f(x) = \frac{\partial\xi(x,t)}{\partial x}f(\xi(x,t)) \equiv f(x,t);\ \frac{\partial\xi}{\partial x} = \frac{\alpha(\xi)}{\alpha(x)}. \tag{9.34}$$

ただし，$\xi = \xi(x,t)$ は，初期条件 $\xi(x,0) = x$ に対する微分方程式 $d\xi/dt = -\alpha(\xi)$ の解である．すなわち，ξ は次の積分によって与えられる：

$$\int_x^\xi \frac{1}{\alpha(u)}du = -t. \tag{9.35}$$

この公式の証明は，1 階線形偏微分方程式に対するラグランジュの補助方程式を解くことによって示される．

また，次のようにして，式 (9.34) の右辺の表式が偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) + \frac{\partial}{\partial x}(\alpha(x)f(x,t)) = 0 \tag{9.36}$$

の解になっていることを直接確かめることも容易である．まず，式 (9.34) の第 2 式 $\partial\xi/\partial x = \alpha(\xi)/\alpha(x)$ は，式 (9.35) の両辺を x で偏微分することによって容易に導ける．次に，式 (9.34) より，

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = \left(\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \xi}{\partial t}\right)\right)f(\xi) + \frac{\partial \xi}{\partial x}\frac{\partial \xi}{\partial t}\frac{df(\xi)}{d\xi}$$
$$= \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial \xi}{\partial t}f(\xi)\right) = -\frac{\partial}{\partial x}(\alpha(\xi)f(\xi)) = -D(\alpha(x)f(x,t)) \quad (9.37)$$

となる．ただし，式 (9.34) の右辺の第 2 式より導ける等式 $\alpha(\xi)f(\xi) = \alpha(x)f(x,t)$ を用いた．

要するに，1 階線形偏微分方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}f(x,t) = -D(\alpha(x)f(x,t)) \quad (9.38)$$

を初期条件 $f(x,0) = f(x)$ の下で解き，その解の表式を求めただけのことであるが，これらの解の表式を直接用いずに，ドリフト演算子のような**指数微分演算子のまま形式的に取り扱う**ほうが見通しが良いことが多い．実際，前節で簡単に説明した「秩序生成のスケーリング理論」の場合には，後で詳しく説明するように大変有効である[7, 8, 16]．これは，**解析を代数的に扱う**典型的な例である．

ついでながら，(i) の平衡移動演算子は，(ii) の特別な場合（$\alpha(x) =$ 定数）になっている．

(iii) 拡散演算子の積分公式とその拡張公式

よく知られているように，**拡散方程式**

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \varepsilon\frac{\partial^2 f}{\partial x^2};\ f(x,0) = f(x) \quad (9.39)$$

の解を表す指数微分演算子に関して次の公式が成り立つ[16]：

$$\exp\left(t\varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)f(x) = (4\pi\varepsilon t)^{-1/2}\int_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{4\varepsilon t}\right)f(y)dy. \quad (9.40)$$

この公式は，式 (9.39) に代入して直接確かめることも容易である．ここでは，次のように，任意の自然数 n に対する方程式

$$\frac{\partial f_n}{\partial t} = \varepsilon\frac{\partial^n f_n}{\partial x^n};\ f_n(x,0) = f_n(x) \quad (9.41)$$

の解を求める一般的な方法を説明する．これは，フーリエ変換の方法によって容易に求められる．まず，初期条件が $\varphi_n(x,0) = \delta(x)$（$\delta(x)$ はデルタ関数）の場合，式 (9.41) の解 $\varphi_n(x,t)$ が求まったとしよう．このとき，一般解は

$$f_n(x,t) = \exp(t\varepsilon D^n)f(x) = \int_{-\infty}^{\infty}\varphi_n(x-y,t)f(y)dy \quad (9.42)$$

と与えられることは容易にわかる[16]．そこで，初期条件が $\delta(x)$ で与えられる $\varphi_n(x,t)$ を次のように

$$\varphi_n(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x}\hat{\varphi}_n(\omega,t)d\omega \quad (9.43)$$

とフーリエ変換する．さらに，$\delta(x)$ のフーリエ表示

$$\delta(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x} d\omega \tag{9.44}$$

と $\varphi_n(x,t)$ に対する偏微分方程式とを用いて，$\varphi_n(x,t)$ のフーリエ成分 $\hat{\varphi}_n(\omega,t)$ を求め，式 (9.43) に代入すると，

$$\varphi_n(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x + t\varepsilon(\mathrm{i}\omega)^n} d\omega \tag{9.45}$$

となる．これを用いて，式 (9.42) より $f_n(x,t)$ が求まる．

式 (9.40) の拡散演算子の場合には，

$$\varphi_2(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega x - t\varepsilon\omega^2} d\omega = (4\pi\varepsilon t)^{-1/2}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{4\varepsilon t}} \tag{9.46}$$

となり，積分表式 (9.40) が式 (9.42) を用いて導かれる．

ついでながら，$n=1$ の場合には，

$$\varphi_1(x,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(x+\varepsilon t)} d\omega = \delta(x+\varepsilon t) \tag{9.47}$$

となり，(i) の平衡移動の公式 (9.31) が再現される．

一般の $n \geq 3$ に対しては，式 (9.45) の積分の収束性などの問題もあるので，これ以上深入りしないことにする．

9.2.2 線形ドリフト演算子と拡散演算子とのリー代数的構造と指数積分解公式

前節で，線形ドリフト演算子 A と拡散演算子 B との間に成り立つ次のリー代数的構造

$$[A,B] = \alpha B;\ A = -\gamma t\frac{\partial}{\partial x}x,\ B = \varepsilon t\frac{\partial^2}{\partial x^2},\ \alpha = 2\gamma t \tag{9.48}$$

に対して指数演算子 e^{A+B} が次のように分解できること[2,16]が秩序生成のスケーリング理論のヒントになったことを説明した：

$$\mathrm{e}^{A+B} = \mathrm{e}^{\lambda s(-\alpha)B}\mathrm{e}^{A}\mathrm{e}^{(1-\lambda)s(\alpha)B};\ s(\alpha) = \frac{1-\mathrm{e}^{-\alpha}}{\alpha}. \tag{9.49}$$

ただし，λ は任意のパラメータである．本節でこの公式の証明を与えることにしよう．まず，式 (9.48) より，次の関係式

$$\mathrm{e}^{A}B\mathrm{e}^{-A} = \mathrm{e}^{\delta_A}B = \mathrm{e}^{\alpha}B,\ \text{すなわち}\ \ \mathrm{e}^{A}B = \mathrm{e}^{\alpha}B\mathrm{e}^{A} \tag{9.50}$$

が成り立つことに注意すると，式 (9.49) の右辺を λ で微分した式は恒等的に（λ によらず）零になることが容易に示せる（$s(-\alpha) = \mathrm{e}^{\alpha}s(\alpha)$ を用いる）．また，$\lambda = 0$ の場合の式の証明も容易にできる．すなわち，

$$F(x) = \mathrm{e}^{-xA}\mathrm{e}^{x(A+B)} \tag{9.51}$$

とおいて，初期条件 $F(0)=1$ のもとで $F(x)$ の微分方程式

$$\frac{d}{dx}F(x) = \mathrm{e}^{-xA}B\mathrm{e}^{x(A+B)} = \left(\mathrm{e}^{-xA}B\mathrm{e}^{xA}\right)F(x) = \left(\mathrm{e}^{-x\alpha}B\right)F(x) \quad (9.52)$$

を解くと

$$F(x) = \exp\left(B\int_0^x \mathrm{e}^{-u\alpha}du\right) = \exp(xs(\alpha x)B) \quad (9.53)$$

となり[16]，$x=1$ とおけば，式 (9.49) の $\lambda=0$ に対する式が得られる．こうして，指数積分解公式 (9.49) が証明される．

9.2.3 秩序生成のスケーリング理論の代数的および解析的構造

前節で議論した秩序生成のもっとも簡単で典型的なモデル（ドリフト項が $\alpha(x)=\gamma x - gx^3$ で与えられる場合）のフォッカー・プランク方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}P(x,t) = -\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x)P(x,t) + \varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2}P(x,t) \quad (9.54)$$

の，秩序生成時間領域における漸近解，すなわち**スケーリング解** $P_{\mathrm{sc}}(x,t)$ は，代数的には，

$$P_{\mathrm{sc}}(x,t) = \exp\left(-t\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x)\right)\exp\left(\varepsilon ts(2\gamma t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right)P(x,0) \quad (9.55)$$

と与えられるのだった[2,16]．また，式 (9.54) の形式的な厳密解は，代数的には，

$$P(x,t) = \exp(A+B)P(x,0);\ A = -t\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x),\ B = t\varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2} \quad (9.56)$$

と表される．ここで，2 つの微分演算子 A と B は互いに非可換であり，$\alpha(x)$ が非線形の関数の場合には交換関係 $[A,B]$ も簡単にはならない．したがって，式 (9.56) は解析的な表式に変換するのが困難である．物理の問題としては，このままでは役に立たない．そこで，筆者は物理的に意味のある漸近解を求める，という戦略を立てた[2,16]．物理的に意味のある漸近解とは，$g\varepsilon \to 0$, $t\to\infty$ かつ $(g\varepsilon/\gamma^2)\exp(2\gamma t) = $ 一定 という**スケーリング極限**で正当化される，いわゆる**スケーリング解**のことである．秩序パラメータ x が $x=0$ の無秩序状態，すなわち，分布関数に対する初期条件 $P(x,0)=\delta(x)$ から系が発展していくとき，上のスケーリング極限に対応する時間（**オンセットタイム**）

$$t_{\mathrm{o}} \sim \frac{1}{2\gamma}\log\left(\frac{\gamma^2}{g\varepsilon}\right) \quad (9.57)$$

の領域で**秩序パラメータがミクロからマクロに成長する**．これを具体的に示すには，スケーリング解 (9.55) を用いて，時刻 t における秩序パラメータ $\langle|x|\rangle_t$ や $\langle x^2\rangle_t$ の値を解析的に求める必要がある．それを実行する際に，前節の指数微分演算子を解析的に表す公式が大いに役立つ．$\alpha(x)=\gamma x - gx^3$ に対する $\xi(x,t)$ は，$\frac{d\xi}{dt} = -\alpha(\xi)$ を初期条件：$t=0$ のとき $\xi = x$ のもとで解いて，

$$\xi = \xi(x,t) = \frac{x\mathrm{e}^{-\gamma t}}{\eta(x,t)};\ \eta(x,t) = \left(1-\frac{g}{\gamma}x^2\left(1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}\right)\right)^{\frac{1}{2}} \quad (9.58)$$

と与えられるから，ドリフト演算子に対する式 (9.34) は，今の場合，

$$e^{-tD(\gamma x - gx^3)} f(x) = \frac{e^{-\gamma t}}{\eta(x,t)^3} f\left(\frac{x e^{-\gamma t}}{\eta(x,t)}\right) \tag{9.59}$$

となる．

こうして，式 (9.40) と式 (9.59) を組み合わせると，スケーリング解 (9.55) は次の積分であらわに与えられる：

$$\begin{aligned} P_{\mathrm{sc}}(x,t) &= \frac{e^{-\gamma t}}{\eta(x,t)^3 (4\pi\varepsilon t s(2\gamma t))^{1/2}} \\ &\quad \times \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x e^{-\gamma t}/\eta(x,t) - y)^2}{4\varepsilon t s(2\gamma t)}\right) P(y,0) dy. \end{aligned} \tag{9.60}$$

ただし，$s(\alpha) = s(2\gamma t)$ は式 (9.49) で定義される．特に，初期条件 $P(x,0) = \delta(x)$ のときは，

$$P_{\mathrm{sc}}(x,t) = \frac{1}{(2\pi\tau(\varepsilon,\gamma,t))^{1/2}\eta(x,t)^3} \exp\left(-\frac{x^2}{2\tau(\varepsilon,\gamma,t)\eta(x,t)^2}\right) \tag{9.61}$$

と具体的に与えられる[7]．ただし，

$$\tau(\varepsilon,\gamma,t) = 2\varepsilon t s(2\gamma t) e^{2\gamma t} = \frac{\varepsilon}{\gamma}(e^{2\gamma t} - 1) \equiv \frac{\gamma}{g}\tau \tag{9.62}$$

である[7]．要するに，**τ は時間 t を指数関数的にくり込んだ時間変数である**．それは，時間 t が大きいときには，$\tau \simeq (g\varepsilon/\gamma^2)\exp(2\gamma t)$ という**指数的スケーリング時間**になる[2,7,8,16]．

このスケーリング解 (9.62) を用いると，任意の自然数 n に対してモーメント $\langle |x|^n \rangle_t$ が，

$$\langle |x|^n \rangle_t^{(\mathrm{sc})} = 2\int_0^{\infty} x^n P_{\mathrm{sc}}(x,t) dx \tag{9.63}$$

によって求められる．（ただし，n が偶数のときは絶対値記号は不要である．また，対称性 $P_{\mathrm{sc}}(-x,t) = P_{\mathrm{sc}}(x,t)$ を前提にしている．初期条件を対称的にすればよい．）変数変換

$$y = \frac{x}{\sqrt{\tau(\varepsilon,\gamma,t)}\eta(x,t)};\ \frac{dy}{dx} = \frac{1}{\sqrt{\tau(\varepsilon,\gamma,t)}}\frac{1}{\eta(x,t)^3} \tag{9.64}$$

および逆変換

$$x^2 = \langle x^2 \rangle_\infty \frac{\tau y^2}{1 + a\tau y^2};\ \langle x^2 \rangle_\infty = \frac{\gamma}{g} \tag{9.65}$$

を行えば，式 (9.62) で定義される τ を用いて，

$$\langle |x|^n \rangle_t^{(\mathrm{sc})} = \langle |x|^n \rangle_\infty^{(\mathrm{sc})} \left(\frac{2\tau^n}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^{\infty} \frac{x^n e^{-x^2/2}}{(1 + a\tau x^2)^{n/2}} dx \tag{9.66}$$

となる[9,17]．ただし，$a = 1 - e^{-2\gamma t} \simeq 1\ (\gamma t \gg 1)$．また，$\langle x^n \rangle_\infty^{(\mathrm{sc})} = (\gamma/g)^{n/2} =$

$\langle x^2\rangle_\infty^{n/2}$ を用いた．

初期分布が，デルタ関数ではなく，少しガウシャン的に幅を持ち，$\langle x^2\rangle_0$ が正の場合には，スケーリング時間 τ を

$$\tau = \frac{g}{\gamma}\left(\frac{\varepsilon}{\gamma} + \langle x^2\rangle_0\right)(\mathrm{e}^{2\gamma t} - 1) \tag{9.67}$$

とすれば，上のスケーリング理論はそのまま有効である[6]．

9.2.4 スケーリング解の物理的意味

スケーリング理論の妥当性を議論する前に，上に求めたスケーリング解の物理的意味を説明しよう．

まず，**スケーリング分布関数** $P_{\mathrm{sc}}(x,t)$ をいくつかのスケーリング時間 τ について示すと，図 9.2 のようになる．秩序パラメータ $\langle|x|\rangle_t$ は，式 (9.66) で $n=1$ とした式，すなわち（少し変形して），

$$\langle|x|\rangle_t^{(\mathrm{sc})} = \langle|x|\rangle_\infty^{(\mathrm{sc})}\left(\frac{2\tau}{\pi}\right)^{1/2}\int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-x}}{(1+2a\tau x)^{1/2}}dx \tag{9.68}$$

で与えられる．この秩序パラメータからのゆらぎ

$$\sigma(t) = \left\langle(|x| - \langle|x|\rangle_t)^2\right\rangle_t = \langle x^2\rangle_t - \langle|x|\rangle_t^2 \tag{9.69}$$

も，式 (9.66) の $n=2$ の場合の積分式と式 (9.68) とを用いて容易に求められる．これらを模式的に示すと，図 9.3 のようになる．

物理的に非常に興味深い特徴の一つは，**秩序パラメータがミクロからマクロに成長する時間領域（オンセットタイム t_o の近傍）でゆらぎが急激に増大することである．この秩序生成が始まる近傍でのゆらぎの急激な増大は**図 9.2 の分

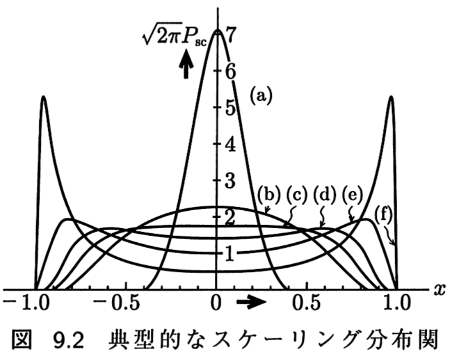


図 9.2 典型的なスケーリング分布関数[6] $P_{\mathrm{sc}}(x,t)$．(a) $\tau=0.02$，(b) $\tau=0.2$，(c) $\tau=\tau_{\mathrm{o}}=\frac{1}{3}$（オンセットタイム），(d) $\tau=0.5$，(e) $\tau=1$，(f) $\tau=4$，ただし，$a=1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}\simeq 1$ とした．

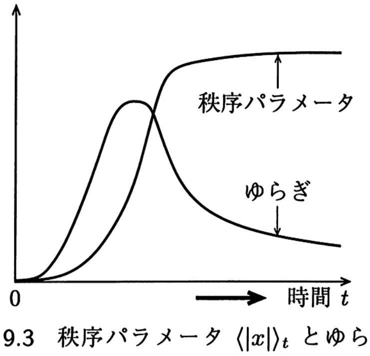


図 9.3 秩序パラメータ $\langle|x|\rangle_t$ とゆらぎ $\sigma(t)=\langle(|x|-\langle|x|\rangle_t)^2\rangle=\langle x^2\rangle_t-\langle|x|\rangle_t^2$ の時間変化．この模式図は，秩序が生成される時間領域（オンセットタイム近傍）でのゆらぎの急激な増大（異常揺動定理）を表している．

布関数の時間変化からも直観的に理解できる．すなわち，最初のうちは $x=0$ を中心にした鋭いシングルピークの分布であるが，時間が経つとその分布の幅（ゆらぎ）が少しずつ広がっていき，やがてダブルピークが現れるようになり，秩序が生成される．この境目の時間が秩序生成のオンセットタイム $t_{\rm o}$ である．ここでは，分布が非常にフラットになる．そのときの τ の値を，スケーリング解 (9.61) から求めると $\tau_{\rm o}=\frac{1}{3}$ となる（$a=1-{\rm e}^{-2\gamma t}\simeq 1$ とした）．こうして，オンセットタイム $t_{\rm o}$ は式 (9.57) で与えられることがわかる．初期分布がデルタ関数ではなく，分布には幅があり $\langle x^2\rangle_0$ が正の値のときには，オンセットタイムは

$$t_{\rm o}=\frac{1}{2\gamma}\log\left(\frac{\gamma^2}{g(\varepsilon+\gamma\langle x^2\rangle_0)}\right) \tag{9.70}$$

となる．この様子は，図 9.3 に如実に示されている．すなわち，秩序パラメータ $\langle|x|\rangle_t$ がミクロ（この図では零）からマクロに急激に（**指数関数的に**）成長する時間領域（**スケーリング時間**）でゆらぎ $\sigma(t)$ が急激に大きくなる．ノイズの強さ ε，非線形性 g および初期のゆらぎ $\langle x^2\rangle_0$ が大きいほど，秩序生成が速く起こることが，式 (9.70) からわかる（**相乗効果**）．これは**異常揺動定理**とも呼ばれる[6)]．この**不安定点からの秩序の指数的成長とゆらぎ増大現象**は，このモデルで記述される系（磁性体など）に限らず，その他多くの物理系で起こる普遍的なものであることを強調したい[2,6~9,17)]．

9.2.5 秩序生成のスケーリング理論の妥当性—摂動展開のボレル和の方法[6)]

9.2.3 項で扱ったフォッカー・プランク方程式 (9.54) は，ランジュバン方程式

$$\frac{dx}{dt}=\alpha(x)+\eta(t) \tag{9.71}$$

で記述される確率過程をまとめて扱う方法を提供するものである[2)]．ただし，$\{\eta(t)\}$ は白色ガウシャンノイズであり，ランダム平均 $\langle\cdots\rangle$ に対して，$\langle\eta(t)\rangle=0$ および

$$\langle\eta(t)\eta(t')\rangle=2\varepsilon\delta(t-t') \tag{9.72}$$

が成り立つ．

式 (9.71) を**スケーリング極限で摂動展開**し，モーメント $\langle x^2\rangle_t$ を求めると，それは

$$\langle x^2\rangle_t=\langle x^2\rangle_\infty\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n-1}(2n-1)!!\tau^n \tag{9.73}$$

となることがわかる[6)]．ただし，$(2n-1)!!=1\cdot3\cdot5\cdot\cdots\cdot(2n-1)$ である．この級数は明らかに収束半径 0 の級数である．そこで，**ボレル和の方法**を用いると，

$$\langle x^2 \rangle_t = \langle x^2 \rangle_\infty \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \int_0^\infty \frac{\tau x^2}{1+\tau x^2} \mathrm{e}^{-x^2/2} dx \tag{9.74}$$

となり，式 (9.66) で $n=2$ とおいたものと一致する（$a=1$ とした）．$\langle x^{2n} \rangle_t$ に対しても同様である．こうして，秩序生成のスケーリング理論の妥当性が示せる[6]．

実は，スケーリング理論に最初に気づいたのは，この摂動展開のボレル和の方法によってである[6]．9.2.3 項のスケーリング理論の代数的構造に気づいたのはその後のことである[2]．

本節では，スケーリング理論の代数的および解析的構造を中心に解説した．その準備として指数演算子のあらわな（積分）表示を詳しく導出し，線形ドリフト項を持つフォッカー・プランク方程式の形式解のリー代数的構造を利用して解析的（積分による）解を求める方法を説明した．そうして得られた解析的な表式を用いて，秩序生成とゆらぎの急激な増大（**異常揺動定理**）や秩序生成へのノイズ，非線形性および初期ゆらぎの相乗効果を議論した．また，摂動展開のボレル和の方法を用いてスケーリング理論の妥当性を議論した．

次章では，平均場近似とスケーリング解との関係や定常解へ正しく近づく分布関数の求め方などを議論する．また，スケーリング理論の応用などにもふれる．

参考文献

1) M. Suzuki, *Physica A* **390**, 1904 (2011); ibid. **391**, 1074 (2012); ibid. **392**, 314 および 4279 (2013).
2) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
3) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2015 年初版，および 2016 年重版）．175 頁の式 (9.68) の 2 つ目の等号の後の $\zeta\langle j^2(t)\rangle_\infty$ は $\zeta\langle j(t)\rangle^2_{t=\infty}$ と訂正する．
4) G. Nicolis and I. Prigogine, *Self-Organization in Nonequilibrium Systems* (1977, New York; Wiley)［小畠陽之助，相沢洋二訳『散逸構造』（岩波書店，1980）］．
5) イリヤ・プリゴジン，ディリップ・コンデプティ著，妹尾学・岩元和敏訳『現代熱力学―熱機関から散逸構造へ』（朝倉書店，2001）．
6) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77, 477 (1976), および **57**, 380 (1977).
7) M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195–278 (1981).
8) M. Suzuki, 第 17 回ソルベイ会議招待講演．詳しくはそのプロシーディングスとして出版された次の本を参照してほしい：*Order and Fluctuations in Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Eds. Nicolis/Dewel/Turner (John Wiley & Sons, Inc. 1981).
9) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* No.**195**, 114 (2012).
10) 文献 6) から 9) までの多数の参考文献．
11) H. Risken, *The Fokker-Planck Equation* (Springer Verlag, Berlin, 1984).
12) R. Kubo, *J. Math. Phys.* **4**, 174 (1963).
13) 鈴木増雄：「手順の分離と統合―指数積分解，秩序生成およびエントロピー生成」荒木不二洋，江口徹，大矢雅則編『量子数理　物理と数学　私の研究』（丸善出版，2012）．
14) N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North-Holland, Amsterdam, 1983). この本では秩序生成のスケーリング理論の要点が紹介されている．
15) 第 26 回（IUPAP の）STATPHYS 国際会議（フランスのリヨン，2016 年 7 月 18 日～22 日），特に，U. Seifert, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 126001 (2012), およびその中の多数の参考文献参照．
16) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2015 年初版，および 2016 年重版）．文中の式 (A3.9) の $f(\alpha)$ は $xf(\alpha x)$ の誤り（2017 年第 3 刷では訂正済）．
17) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B* **26**, No.1, 1250001 (2012).

第 10 章
指数的時間のスケーリング理論

10.1　スケーリング理論の数理

本章では秩序生成に関する**指数的時間のスケーリング**解の数理的特徴を詳しく解説し，その数理と物理との美しい絡み合いを例示する．非平衡系の取扱いでよく現れる漸近級数の物理的解釈を与え，それらが統計物理学でよく現れる理由を説明する．さらに，漸近級数をより発散の強い（超）漸近級数に拡張し，その和の取り方（多重積分法）についても議論する．

10.1.1　秩序生成の「ノイズ支援の平均場理論」

前章では，秩序生成に関する指数的時間のスケーリング理論[1]を議論してきた．その理論で主に扱ったモデルは，相転移の平均場理論に相当する**ランダウの有効ポテンシャル**

$$\hat{U}(x) = -\frac{\gamma}{2}x^2 + \frac{g}{4}x^4 \tag{10.1}$$

に基づくランジュバン方程式

$$\frac{dx}{dt} = -\frac{d\hat{U}(x)}{dx} + \eta(t) \tag{10.2}$$

である．ここで，x は系の秩序パラメータを表し，転移点より上の無秩序状態では $\gamma < 0$ であり，秩序状態では $\gamma > 0$ である．転移点では $\gamma = 0$ である．前章と同様に，$\eta(t)$ は**白色ガウシャンノイズ**とする．ランダウの有効ポテンシャル $\hat{U}(x)$ を模式的に示すと，図 10.1 のようになる．このように，式 (10.2) は，ノイズ $\eta(t)$ がなければ，平均場理論でのダイナミクスを記述する方程式である[2]．これではゆらぎが全く無視されているため，系が初期に無秩序状態 $x(0) = 0$ にあると，$t > 0$ でも恒等的に $x(t) \equiv 0$ となってしまい，秩序生成が記述できない．そこで，式 (10.2) のようにノイズ $\eta(t)$ を入れた**確率的方程式**を扱う必要に迫られるのである．そうすると，もはや厳密的に解くことが困難となり，前章

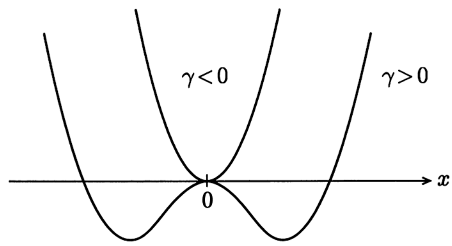


図 10.1　ランダウの有効ポテンシャル $\hat{U}(x)$.

で議論した**漸近法**による**指数的時間のスケーリング理論**が有効的に利用されることになる.

ところで，もともと有効ポテンシャル $\hat{U}(t)$ が平均場近似の意味合いで導かれたものであるから，ノイズを入れた式 (10.2)，すなわち

$$\frac{dx}{dt} = \gamma x - gx^3 + \eta(t) \tag{10.3}$$

を「平均場近似的に」解き[3,4]，その解をスケーリング解と比較するのも興味深いことであろう.

そこで，式 (10.3) の両辺に $2x$ をかけて，$\eta(t)$ に関する統計平均 $\langle\cdots\rangle$ をとると，εg が小さい極限（**スケーリング極限**）で成り立つ関係式 $\langle x(t)\eta(t)\rangle = 2\varepsilon$ を用いて，

$$\frac{dy}{dt} = 2(\gamma y - gy^2 + \varepsilon);\ y = y(t) = \langle x^2\rangle_t \tag{10.4}$$

が得られる．ただし，$\langle x^4\rangle_t \simeq \langle x^2\rangle_t^2 = y^2$ という**平均場近似的処法**（すなわち，4 次モーメント以上の切断近似）を用いた．今，初期に系は無秩序状態にあると考えると，$x(0) = 0$ であり，ゆらぎ $y(0) = \langle x^2\rangle_0$ もノイズの強さ ε のオーダーであるとみなせる．この状況で式 (10.4) を解くには，$\gamma y - gy^2 + \varepsilon \equiv g(\alpha - y)(y - \beta)$ と分解し，$\alpha \simeq \gamma/g$, $\beta \simeq -\varepsilon/\gamma$ と近似することにより，

$$y(t) \simeq y(\infty)\frac{\tau}{1+\tau} \tag{10.5}$$

と求まる．ただし，スケーリング時間 τ は

$$\tau = \frac{g}{\gamma}\left(\langle x^2(0)\rangle + \frac{\varepsilon}{\gamma}\right)(\mathrm{e}^{2\gamma t} - 1) \simeq \frac{g}{\gamma}\left(\langle x^2(0)\rangle + \frac{\varepsilon}{\gamma}\right)\mathrm{e}^{2\gamma t} \tag{10.6}$$

である．また，$y(\infty) = \gamma/g$ と近似した．上のいわば「ノイズ支援の平均場近似」では，関係式 $\langle x(t)\eta(t)\rangle = 2\varepsilon$ を通して 2 次モーメントにはノイズの効果が入っており，$\langle x^2(0)\rangle = 0$ でも式 (10.6) からわかる通り系は時間発展する.

こうして，モデル (10.2) に対する平均場近似的な解が求まり，無秩序状態から秩序状態 $y = y(\infty)$ に発展する定性的な様子がわかる．このように簡単な近似で求めた解でも，その近似の条件から当然ではあるが，スケーリング的な性質を持っている．すなわち，規格化されたモーメント $y(t)/y(\infty)$ は，スケーリ

ング時間 τ だけの関数 $\tau/(1+\tau)$ で表されている．もちろん，このスケーリング関数は近似的である．この平均場近似的な解と正しいスケーリング解との概念的関係については次項で議論する．

10.1.2　ボレル変換の物理的解釈——ストカスティック時間スケーリング

前章で説明した通り，$g\varepsilon \to 0,\ t \to \infty$ かつ $(g\varepsilon/\gamma^2)\exp(z\gamma t) =$ 一定 という**指数的時間のスケーリング極限**では，2 次のモーメント $\langle x^2 \rangle_t$ は

$$\frac{\langle x^2\rangle_t}{\langle x^2\rangle_\infty} \equiv \frac{y(t)}{y(\infty)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty \frac{\tau x^2}{1+\tau x^2}\mathrm{e}^{-x^2/2}dx \tag{10.7}$$

と表される[1,3,4]．これは，**ノイズ支援の平均場近似式 (10.5) に含まれる指数的スケーリング時間 $\boldsymbol{\tau}$ でのスケーリング $\boldsymbol{\tau \to s\tau}$ の大きさ $\boldsymbol{s = x^2}$ を確率的にガウス分布させ，それで平均したものと解釈することができる**（ここでのスケール s は実時間 t のスケーリングではないことに注意されたい）．

後で詳しく述べるように，式 (10.7) は一種のボレル変換（発散級数を収束する級数の積分形に表すこと）になっている．この意味で，**ボレル変換は，物理的に見ると，発散級数の変数をスケール変換し，そのスケールを確率的に分布させ平均をとったものと捉えることができる．**

10.1.3　指数的時間のスケーリング解の表し方（ボレル和）と興味深い積分等式

非線形ランジュバン方程式 (10.3) は，秩序生成のもっとも簡単で基本的な物理的モデルであると同時に，数理的にも大変興味深いモデルであり，その指数的時間のスケーリング解は以下に示すように面白い数学的特徴を持っている．

式 (10.7) で表されている 2 次モーメント $\langle x^2\rangle_t$ の規格化された指数的時間のスケーリング解は，容易に

$$\frac{\langle x^2\rangle_t}{\langle x^2\rangle_\infty} = 1 - \sqrt{\frac{2}{\pi}}\int_0^\infty \frac{1}{1+\tau x^2}\mathrm{e}^{-\frac{x^2}{2}}dx \tag{10.8}$$

と変形できる．積分公式[5)]

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-a^2x^2}}{x^2+b^2}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{b}\mathrm{e}^{a^2b^2}\int_{ab}^\infty \mathrm{e}^{-x^2}dx \tag{10.9}$$

を用いると，式 (10.8) は誤差関数積分 $\mathrm{Erfc}(x)$ を用いて次のように表せることがわかる：

$$\frac{\langle x^2\rangle_t}{\langle x^2\rangle_\infty} = 1 - \sqrt{\frac{2}{\tau}}\ \mathrm{e}^{\frac{1}{2\tau}}\,\mathrm{Erfc}\left(\frac{1}{\sqrt{2\tau}}\right). \tag{10.10}$$

ただし，$\mathrm{Erfc}(x)$ は次式で定義される：

$$\mathrm{Erfc}(x) = \int_x^\infty \mathrm{e}^{-t^2}dt. \tag{10.11}$$

さらに興味深いことに，式 (10.10) で $x^2 - \frac{1}{2\tau} = t$ と変数変換すると，「より簡

単な表式」

$$\frac{\langle x^2\rangle_t}{\langle x^2\rangle_\infty} = 1 - \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{1+2\tau t}}\,dt \equiv 1 - R(2\tau) \tag{10.12}$$

が導かれる．一方，式 (10.8) で $t = \frac{x^2}{2}$ として変数変換すると，

$$\frac{\langle x^2\rangle_t}{\langle x^2\rangle_\infty} = 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{(1+2\tau t)\sqrt{t}}\,dt \equiv 1 - \frac{1}{\sqrt{\pi}}\,S(2\tau) \tag{10.13}$$

と書ける．

こうして，$\tau \geq 0$ に対して，次の興味深い積分等式が得られる：

$$\frac{S(2\tau)}{R(2\tau)} = \sqrt{\pi}. \tag{10.14}$$

この等式のどこが面白いかと言うと，あらわに π を含まない 2 つの関数の比が変数 $\tau(\geq 0)$ の値によらず，$\sqrt{\pi}$ という無理数で表されるということである．実際，この等式を公式 (10.9) を用いずに（気づかずに）直接証明しようとすると困難である．もちろん，$\sqrt{\pi}S(2\tau)$ と $R(2\tau)$ を τ で級数展開すれば，両者が**漸近級数**としては同じ式になることが示せる．しかし，関数としては厳密に同じとは言えない（$\mathrm{e}^{-1/\tau}$ などの不定性が残る）．両者が一致することを証明することは，結局，積分公式 (10.9) を導くことに帰着する（これは単なる変数変換では示せない）．そこで，式 (10.9) の両辺に $\mathrm{e}^{-a^2b^2}$ をかけて，両辺の差を a の関数とみて a で微分し，それが恒等的に零になり，また $a = 0$ で（両辺が共に $\pi/(2b)$ となり）その差が零になることを確かめることにより式 (10.9) が成り立つことがわかる．この証明法はよく用いられる便利な方法である[6]．

このように，2 つの関数の比が無理数 π を用いて表されるのは，これらの関数の一方が幾何学的には円を用いて求められる量であることを示している．実際，式 (10.10) からわかる通り，それは，ガウス平面上の円を用いた 2 重積分で求められるからである．

無理数 e と π が絡んだ美しい公式としては，次の**オイラーの公式**

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi} + 1 = 0 \tag{10.15}$$

がよく知られている．これも指数関数と 3 角関数のオイラーの公式 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta} = \cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta$ から導かれるので，円の極座標表示 $(r\cos\theta, r\sin\theta)$ と関係して，無理数 π が現れる．

次に面白い例は，自然数 n と $n+\frac{1}{2}$ に対する**ガンマ関数**である．その比には $\sqrt{\pi}$ が出てくる．実際，これは次の公式[5]から明らかである：

$$\Gamma(n+1) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t}t^n dt = n!,\ \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}. \tag{10.16}$$

実は，積分等式 (10.14) には，上のガンマ関数の性質が反映されている．実際，$R(x)$ と $S(x)$ は

$$R(x) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{1+xt}}\,dt = \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \frac{(2n-1)!!}{2^n n!}\Gamma(n+1)x^n, \tag{10.17}$$

および

$$S(x) = \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{(1+xt)\sqrt{t}}\,dt = \sum_{n=0}^\infty (-1)^n \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) x^n, \tag{10.18}$$

と展開できる．これらは，収束半径零の**漸近級数**である．逆に，$R(x)$ と $S(x)$ はこれらの**ボレル和**である．前に述べたように，式 (10.16) と上の 2 つの漸近展開式からも，式 (10.14) すなわち $S(x) = \sqrt{\pi}R(x)$ は一応うなずける．

以上，対称性の高い 2 次モーメントの漸近展開とボレル和について議論したが，これとは対称性の異なる 1 次モーメント（秩序パラメーター）$\langle |x| \rangle_t$ も同様の興味深い数理的特徴を持っている．初期条件が，分布関数 $P(x,t)$ に対して，$P(x,0) = \delta(x)$ のように対称的な場合には，任意の t に対しても $P(x,t)$ は対称的である：$P(-x,t) = P(x,t)$．したがって，奇数次のモーメント $\langle x^{2n-1} \rangle_t$ は恒等的に零である．そこで，秩序パラメーターとしては，$\langle |x| \rangle_t$ を考える．これは，対称的な初期条件の下で，

$$\langle |x| \rangle_t = 2\int_0^\infty xP(x,t)dx \tag{10.19}$$

によって定義される．

前章の式 (9.67) より，$a = 1 - \mathrm{e}^{-2\gamma t} \simeq 1$ のスケーリング時間領域では，秩序パラメーターのスケーリング解は

$$\frac{\langle |x| \rangle_t}{\langle |x| \rangle_\infty} = \sqrt{\frac{2\tau}{\pi}} \int_0^\infty \frac{\mathrm{e}^{-t}}{\sqrt{1+2\tau t}}\,dt = \sqrt{\frac{2\tau}{\pi}} R(2\tau) \tag{10.20}$$

と与えられる．こうして，面白いことには，1 次と 2 次のモーメントは次の和則（sum rule）

$$\sqrt{\frac{\pi}{2\tau}} \frac{\langle |x| \rangle_t}{\langle |x| \rangle_\infty} + \frac{\langle x^2 \rangle_t}{\langle x^2 \rangle_\infty} = 1 \tag{10.21}$$

をみたしていることが式 (10.12) から結論される．すなわち，秩序生成の指数的時間のスケーリング理論では，$\langle x^2 \rangle_\infty = \langle |x| \rangle_\infty^2 = \gamma/g$ に注意すると，

$$\langle |x| \rangle_t = \sqrt{\frac{2\tau}{\pi}} \frac{\langle x^2 \rangle_t - \langle x^2 \rangle_\infty}{\langle |x| \rangle_\infty} \tag{10.22}$$

という関係式が成り立っている．これは，言わば，一種の「ゆらぎと秩序の関係」を表している．比例係数に $\sqrt{\pi}$ が現れていることに注意されたい．

10.1.4 拡張されたボレル変換

(i) 重みつきボレル変換と (m,n) 次ボレル変換

通常のボレル変換は，収束する級数で与えられる関数 $f(x)$ に対応してその級数の各項が $n!$ 倍された（収束半径零の）級数の総和を次の積分で与えるものである：

$$f^{(\mathrm{B})}(x) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t} f(xt)dt. \tag{10.23}$$

式 (10.17) で定義される $R(x)$ は，この通常のボレル和になっているが，式 (10.18) の $S(x)$ は，$\frac{1}{\sqrt{t}}$ の重みがついていて少し拡張されている．これを**重みつきボレル変換**と呼ぶことにしよう．これは変数変換によって

$$f_{m,n}^{(\mathrm{B})}(x) = \int_0^\infty \mathrm{e}^{-t^m} f(xt^n)dt \tag{10.24}$$

の形に変えることもできる．これを **(m, n) 次ボレル変換**と呼ぶことにする．式 (10.7) や式 (10.8) などは $m = n = 2$ の例になっている．関数 $f(x)$ が級数展開で与えられているときに，$f_{m,n}^{(\mathrm{B})}(x)$ の漸近展開を求めるには，次のよく知られた公式[5)]が役立つ：

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-t^q} t^p dt = \frac{1}{q}\Gamma\left(\frac{p+1}{q}\right). \tag{10.25}$$

ただし，$p > -1$ および $q > 0$ である．

公式 (10.25) から容易にわかるように，実用的なのは，通常の $m = n = 1$ の場合と，本節の $m = n = 2$ の場合だけである．他の場合は複雑過ぎて役に立ちそうにない．

(ii) 多重ボレル変換

実際に役立つかどうかはまだわからないが，通常のボレル変換の対象になる漸近級数よりさらに急激に発散する次の級数（いわば「超漸近級数」）を考える：

$$S_m(x) = \sum_{n=0}^\infty a_n x^n;\ a_n \sim (n!)^m. \tag{10.26}$$

通常のボレル変換は $m = 1$ の場合である．2 以上の自然数 m に対しては，$S_m(x)$ は次の多重積分で表される：

$$S_m(x) = \int_0^\infty dt_1 \int_0^\infty dt_2 \cdots \int_0^\infty dt_m \mathrm{e}^{-t_1-t_2-\cdots-t_m} Q_m(t_1 t_2 \cdots t_m x). \tag{10.27}$$

ただし，$Q_m(x)$ は次式で定義される収束する関数である：

$$Q_m(x) = \sum_{n=0}^\infty \frac{a_n}{(n!)^m} x^n. \tag{10.28}$$

超漸近級数の多重積分公式 (10.27) の単一性[5)]（すなわち，$m \geq 2$ に対する漸近級数としての項別積分可能性）については，ここでは立ち入らないことにする．

10.1.5 終領域での指数的時間のスケーリング解の改良

今までいろいろと議論してきた指数的時間のスケーリング解は，秩序が生成される時間領域で漸近的に正しく系の振舞いを記述されるものであり，$t \to \infty$

での定常状態でのゆらぎは無視されている．その効果を取り込むには，指数的時間のスケーリング解 $P_{\rm sc}(x,t)$ にさらに次の指数拡散演算子を施せばよい：

$$\tilde{P}_{\rm sc}(x,t) = \exp\left(\varepsilon_{\rm f}(t)\frac{\partial^2}{\partial x^2}\right) P_{\rm sc}(x,t). \tag{10.29}$$

ただし，$\varepsilon_{\rm f}(t)$ は終領域でのみ正しいゆらぎを与えるパラメータであり，それは，$t\to\infty$ で $\varepsilon_{\rm f}(t)\to\varepsilon/(4\gamma)$ をみたす．しかも，初期から指数的時間のスケーリング領域までは $\varepsilon_{\rm f}(t)\ll\varepsilon_{\rm f}(\infty)$ をみたしている．この条件の下では，明らかに

$$\tilde{P}_{\rm sc}(x,\infty) = \frac{1}{2\sqrt{4\pi\varepsilon}}\left({\rm e}^{-\frac{(x-x_{\rm st}^2)}{4\varepsilon}} + {\rm e}^{-\frac{(x+x_{\rm st}^2)}{4\varepsilon}}\right) \tag{10.30}$$

となり，小さな ε に対しては $P_{\rm st}(x)$ を再現している．ただし，$x_{\rm st}=(\gamma/g)^{1/2}$ である．

このように，後から手で入れた指数拡散演算子で定常状態を再現しただけではあるが，秩序生成のような非平衡現象を代数的取扱い（近似法）で統一的に説明できる一つの典型的な例になっているという点で興味深い．

秩序生成の指数的時間のスケーリング解（ボレル和）とノイズ支援の平均場近似解との関係を調べ，ボレル和の物理的解釈を与えた．すなわち，平均場近似のスケーリング関数の変数 τ のスケールをガウス分布させて得られるモーメント $\langle x^2\rangle_t$ が指数的時間のスケーリング解になっている．これは，結果として，発散する漸近級数を積分形で表すボレル変換の物理解釈を与えることになる．非平衡統計物理でよく利用される動的感受率 $\chi(\omega)$ の逆周波数展開（すなわち $1/\omega$ の展開）が漸近級数になる物理的理由も本節の議論と全く同じである．すなわち，ゆらぎの効果で高次のモーメントの大きさが急激に増大するのである．

また，通常の漸近級数より発散の強い「**超漸近級数**」を導入し，その和の取り方として多重積分法を説明した．

指数的時間のスケーリング理論と，それに関連すると思われる他の分野の理論（インフレーションモデルなど）との数理的共通点に関する話題には，次章でふれる．

補遺：解析的問題の代数的（指数積）近似法の再考

前章で議論した通り，線形拡散現象に対するフォッカー・プランク方程式 (9.11) の解は，形式的には式 (9.16)，すなわち（時間変数 t を顕わに入れた：$A\to tA$, $B\to tB$ とした），

$$P(x,t) = {\rm e}^{tA+tB}P(x,0);\ A=-\gamma\frac{\partial}{\partial x}x,\ B=\varepsilon\frac{\partial^2}{\partial x^2} \tag{10A.1}$$

と書ける．2 つの演算子は交換関係 $[A,B]=(2\gamma)B$ をみたす．したがって，指数演算子 ${\rm e}^{tA+tB}$ は厳密に 2 つの指数演算子

$${\rm e}^{tA+tB} = {\rm e}^{tA}{\rm e}^{s(2\gamma t)tB};\ s(\alpha)=\frac{1-{\rm e}^{-\alpha}}{\alpha} \tag{10A.2}$$

に分解できるので，$P(x,t)$ の解析的（積分）表式が求まる．これは拡散項 B に $s(2\gamma t)$ という「くり込み操作」が行われているためである．もし，指数演算子 e^{tA+tB} を，単純な指数積 $\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ で近似し，無謀にも時間の全領域に適用したら，どんな物理現象を扱っていることに相当するのかを調べてみることは，興味深いことであろう．この近似解を $P_1(x,t)$ と書くことにする．すなわち，$P_1(x,t) = \mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}P(x,0)$ である．指数演算子 e^{tA} と e^{tB} の解析的（積分）表示法がわかっているので，初期の分布関数 $P(x,0)$ を与えれば $P_1(x,t)$ は具体的に求めることは容易である．ところで，近似解 $P_1(x,t)$ の全時間領域における振舞いを定性的に知るには，指数積 $\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB}$ を再び一つの指数積にまとめるとよい．有名な BCH 公式[6]を用いてこれを実行することもできるが，前章で説明した公式 (9.49) を逆に解いた公式

$$\mathrm{e}^{tA}\mathrm{e}^{tB} = \exp\left(tA + \frac{2\gamma t^2}{1-\mathrm{e}^{-2\gamma t}}B\right) \tag{10A.3}$$

を用いると便利である．この近似解の振舞いを 2 つの場合（$\gamma > 0$ と $\gamma < 0$）に分けて説明する．

a) $\gamma > 0$ の場合（$x = 0$ が不安定点）

式 (10A.3) からわかる通り，拡散効果が強調され過ぎている（t が大きいところで，tB の代わりに $2\gamma t^2 B$ になる）．

b) $\gamma < 0$ の場合（$x = 0$ が安定点）

この場合には，初期分布を $P(x,0) = \delta(x)$ とすると

$$P_1(x,t) = (4\pi\varepsilon t)^{-1/2}\mathrm{e}^{-\gamma t}\exp\left(-\frac{x^2}{4\varepsilon t\mathrm{e}^{2\gamma t}}\right) \tag{10A.4}$$

となる．これは，時間 t が小さいときは，一時的に正確な分布関数 $P(x,t) = \mathrm{e}^{tA+tB}\delta(x)$ の定常解 $P_{\mathrm{st}}(x) = (2\pi\varepsilon/\gamma)^{-1/2}\exp[-x^2/(2\varepsilon/\gamma)]$ に少し近づくが，やがて，$t \to \infty$ では，$P_1(x,t) \to \delta(x) = P_1(x,0)$ となり，初期分布に戻ってしまう（ブーメラン現象）．この振舞いは，式 (10A.3) の拡散項の時間依存性からもわかる．このように，第 1 近似を適用限界を越えて用いると，いかに悪い結果になるかがわかる．逆に，このことから，式 (10A.2) のようにくり込まれた指数積をヒントに構築した指数的時間のスケーリング理論が大きな t でも物理的であることがうなずける．

10.2 スケーリング理論に関わる話題としての宇宙のインフレーションなど

近年，図書館に通うことが多くなり，新しい本を見つける楽しみが増えた．特に，最近読んだ S. ワインバーグの『科学の発見』の中の次の言葉[7]：**「科学の進歩とは，おもに，どんな問題を問題にすべきかを発見することだったのである.」**は，我々研究者にとって，つくづく身にしみる．本節の話題としては，宇

宙の膨張の問題[8~14)]を，前節で説明した「秩序生成のスケーリング理論[1)]の視点から取り上げたい[15)]．宇宙の研究は総合科学であり，様々な分野の物理学と関連しており，宇宙に起こる現象も極めて多様である．それらを理解しようと宇宙科学の文献[8~14)]を読み出すと疑問は深まり，フラストレーションが増すばかりである．それでも，宇宙の膨張の問題は，この連載の中心テーマである「**現象の数理構造の普遍性**」という視点から大変興味深い．特に，**宇宙膨張**をその時間スケーリングの側面に焦点をしぼって現象論的に解説する．

歴史的には，最初に宇宙膨張を提唱したのは，気象学者の A.A. フリードマンであった[10~12)]．ハッブルの法則（宇宙空間のスケールが距離に比例して膨張すること）が実験的に発見される 7 年前の 1922 年のことであった（フリードマン自身は，その発見を知ることなしに 1925 年に亡くなった）．ただし，**フリードマンの宇宙**の半径は時間 t に関して $t^{\frac{1}{2}}$ ないし $t^{\frac{2}{3}}$ の巾則で大きくなるものである[9,12,13)]．これは，後で説明する**指数関数的宇宙膨張**に移る手前の一瞬の振舞いを説明することはできても，宇宙の一様性の問題や地平線問題を解決するには至らなかった[10~12)]．

これらの問題は，次に議論する佐藤・グースによる宇宙のインフレーション機構によって解決された[8,9)]．それは，1980 年代に入ってからであった．

10.2.1　宇宙インフレーションに対する秩序生成のスケーリング理論的視点

宇宙の膨張に関する研究は，理論的にも実験的にも最近ますます盛んになってきているようであるが，ここでは，宇宙の指数関数的膨張を最初に提案された佐藤の理論[8)]に着目しよう．

宇宙を一様なものとして，その中の任意の点を中心として宇宙空間と共に変化する半径 R の球，いわゆる「共動球」を設定する．その一般相対論的な力学の方程式（アインシュタイン方程式）は，エネルギー保存則と組み合わせることにより（ここでは天下り的に書くことにして），

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)^2 = \chi^2 R^2 + \frac{k^2}{R^2} \tag{10.31}$$

と表せる[8)]．ただし，上式右辺の第 1 項は真空密度 ρ_0 に基づく重力と熱的張力との和による有効的膨張効果を表す項であり，その係数 χ^2 は重力定数 G と ρ_0 を用いて

$$\chi^2 = \frac{8\pi G}{3}\rho_0 \tag{10.32}$$

と書ける[8,9)]．また，第 2 項 k^2/R^2 は $R=0$ で発散する．これは，一見すると特異な項であるが，すぐ後で議論するように，宇宙の始まりの効果を与える項である．グースの理論では，宇宙空間のスケール R の代わりに，宇宙の温度 T を用いて定式化しており，$TR=$ 一定 の関係にあるので，$R=0$ は $T=\infty$ に対応する．

微分方程式 (10.31) の右辺は，上にも述べた通り，$R=0$ を特異点とする関数であるが，半径 R の共動球の表面積に対応する変数 $S=R^2$ を用いて変数変換すると，次のように特異点のない微分方程式になる：

$$\frac{dS}{dt}=2\chi\left(S^2+\varphi^2\right)^{\frac{1}{2}};\ \varphi=\frac{k}{\chi}. \tag{10.33}$$

初期時刻 $t=0$ で $S=0$ とおくと，式 (10.33) より $t=0$ での表面積の膨張率 $\dot{S}=2R\dot{R}$ は $2k$ となる．すなわち，$t=0$ で “$0\times\infty=$ 有限” となり，式 (10.31) の右辺第 2 項の係数 k は**共動球の表面積**の膨張率に対応する．この第 2 項 k^2/R^2 の詳しい導出は文献 8)（および 9)）に譲るとして，ここでは，わかり易い新しい解釈を与えることにしよう．

よく知られているように，初期条件，$t=0$ で $R=0$（すなわち $S=0$），の下で式 (10.31)（すなわち式 (10.33)）の解は厳密に

$$R(t)=S(t)^{\frac{1}{2}}=(\varphi\sinh(2\chi t))^{\frac{1}{2}} \tag{10.34}$$

で与えられる[8)]（文献 8) では，$\varphi=1,\chi=1$ と規格化されている）．

さて，最もわかり易い微分方程式は線形微分方程式であるから，初期時間領域（$t=0$ 近傍）と終時間領域（$t=\infty$ 近く）で漸近的に厳密解を与えるような大域的に近似する線形方程式を求めてみる．式 (10.33) の右辺の根号の中の 2 次式を次のように変形してみよう：

$$S^2+\varphi^2=(S+\varphi)^2-2S\varphi=(S+\varphi)^2\left(1-\frac{2S\varphi}{(S+\varphi)^2}\right). \tag{10.35}$$

これより，

$$\left(S^2+\varphi^2\right)^{\frac{1}{2}}=(S+\varphi)+\mathrm{O}\left(\frac{S\varphi}{S+\varphi}\right) \tag{10.36}$$

と近似できる．実際，相対誤差に関しては，次の不等式が成り立つ：

$$\left|\frac{\left(S^2+\varphi^2\right)^{\frac{1}{2}}-(S+\varphi)}{S+\varphi}\right|\leq\frac{S\varphi}{(S+\varphi)\left(S^2+\varphi^2\right)^{1/2}}\approx\frac{S\varphi}{(S+\varphi)^2}. \tag{10.37}$$

すなわち，$S=0$ の近傍では，相対誤差は $\mathrm{O}(S)$ で小さくなり，$S=\infty$ 近くでは，相対誤差は $\mathrm{O}\left(\frac{1}{S}\right)$ で小さくなる．したがって，大域的に良い精度で，すなわち，スケルトナイズされたグローバル近似で，微分方程式 (10.33) は，線形微分方程式

$$\frac{dS}{dt}=2\left(\chi S+k\right) \tag{10.38}$$

によって代用できることがわかる．この解は，初期条件 $S(0)=0$ の下で，容易に

$$S=S(t)=\varphi\left(\mathrm{e}^{2\chi t}-1\right);\ \varphi=\frac{k}{\chi} \tag{10.39}$$

となる．

この解は，相対誤差の不等式 (10.37) を用いた前の議論からも明らかなように，$t=0$ の近傍の解 $S \simeq 2kt$，すなわち，$R \simeq (2kt)^{\frac{1}{2}}$ は，厳密解 (10.34) から求めた，同じ時間領域の解と完全に一致する．また，$t=\infty$ 近くでの指数時間的解 $S \simeq \varphi \mathrm{e}^{2\chi t}$，すなわち，$R \simeq \varphi^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\chi t}$ は，同様に，厳密解 (10.34) から求めた，同じ時間領域の解と完全に一致する．

さて，**線形微分方程式 (10.38) は，前節で説明した秩序生成のスケーリング解**[1]**の ε の 1 次項にちょうど対応している**．すなわち，非線形項のないランジュバン方程式 (10.33) に対する解 $y=y(t)=\langle x^2 \rangle_t$ に関するノイズ支援の平均場近似式

$$\frac{dy}{dt} = 2(\gamma y + \varepsilon) \tag{10.40}$$

に対応している．式 (10.38) と式 (10.40) とを比較すると，宇宙の膨張率 χ は，不安定系のリャプノフ指数 γ に対応し，宇宙膨張のパラメータ k は，熱的なゆらぎの強さ ε に対応しており，**それは実際に真空エネルギーの熱揺動に起因するものと解釈できる**．さらに，式 (10.38) は秩序生成のスケーリング時間 $\tau \sim \frac{\varepsilon}{\gamma}\left(\mathrm{e}^{2\gamma t}-1\right)$ に対応していることは，「現象の数理構造の普遍性」という視点から見ても大変興味深い．

10.2.2　宇宙初期の量子重力効果に関する現象論的・スケーリング的考察

前項までは，主に宇宙初期の膨張を真空エネルギーのゆらぎによって，まず，膨張のスケール $R(t)$ が $R(t) \sim t^{\frac{1}{2}}$ で立ち上がり，やがて指数関数的に $R(t) \sim \exp(2\chi t)$ で膨張することを議論した．

ここでは，重力を量子化した場合に，宇宙初期のスケール R が時間 t と共にどのように変化するかを現象論的に議論することにしよう．そのためには，佐藤・グースの式 (10.31) が，$R=0$ の近傍で量子重力効果によってどのように修正を受けるかを考察すればよい．

そもそも，佐藤（・グース）の式 (10.31) の右辺第 2 項 k^2/R^2 の R 依存性はニュートンの重力の逆 2 乗則に由来している．重力を量子化すると[16~18]，R が小さい領域で，量子効果により逆 2 乗則からずれると予想される．この難問はまだ解決されていないようであり，いろいろな試みが進行中である[16~18]．たとえば，ニュートンの重力ポテンシャル

$$V_{\mathrm{N}}(R) = \frac{Gm}{R} \tag{10.41}$$

に対する補正として，$1/R$ の摂動計算が試みられているが，最初の補正 $1/R^2$ の項の量子的計算を現状の統一理論の範囲で行うと確率が 1 を越えるようなプロセスを含むことになるようで，新粒子を導入しないとこの矛盾が解決できないらしい[18]．それなら，いっそのこと，専門外の筆者の乱暴な推測を許して頂いて，この $1/R^2$ の補正は現れず，最初の量子効果は $1/R^3$ から現れると考え

てはどうであろうか．その場合にも同様の矛盾が現れたら，この推測は放棄しなければならない．大変勝手な話ではあるが，$1/R^3$ の量子効果が矛盾なく有限の値で決まると仮定すると，次のように初期宇宙の形成に関する面白い議論ができることになる．すなわち，式 (10.31) に量子効果として，力に変換するとマイナスの巾が 1 つ上がった $1/R^4$ の項が追加され，量子重力効果を含む方程式

$$\left(\frac{dR}{dt}\right)^2 = \chi^2 R^2 + \frac{k^2}{R^2} + \frac{q^2}{R^4} \tag{10.42}$$

が期待される．ここで q はプランク定数 $\hbar$ を含む適当な定数である．

さて，この方程式は楕円積分を用いて解くことができるが，ここでは，前項で行った**大域的近似法による線形化**を行うことにする．まず，式 (10.42) の右辺の第 2 項は，R が小さいときには，第 3 項に比べて無視できる．さらに，第 2 項は R が大きいときには，第 1 項に比べて無視できる．こうして，式 (10.42) は，

$$\frac{dR}{dt} = \left(\chi^2 R^2 + \frac{q^2}{R^4}\right)^{\frac{1}{2}} \tag{10.43}$$

と近似できる．さらに，式 (10.33) の導出と同様にして，式 (10.43) は

$$\frac{dR}{dt} = \chi R + \frac{q}{R^2} \tag{10.44}$$

のように，大域的に精度よく近似できる．ここで，**共動球の "体積"** $V = R^3$ を変数にして，上式を書き換えると

$$\frac{dV}{dt} = 3\left(\chi V + q\right) \tag{10.45}$$

と線形化できる．この解は，初期条件，$t = 0$ で $V = 0$，の下で

$$V = V(t) = \frac{q}{\chi}\left(\mathrm{e}^{3\chi t} - 1\right) \tag{10.46}$$

となる．時刻 t が $t = 0$ の近傍では，

$$V(t) \simeq 3qt \tag{10.47}$$

のように，共動球の体積が t に比例する．したがって，スケール R は $t^{\frac{1}{3}}$ に比例する．

この推測に基づく宇宙膨張の特徴としては，真空エネルギーの圧力が共動球の表面に働いて面積 S が物理的パラメータとなり，宇宙生成の初期で S が t に比例するのに対して，量子重力効果は，体積すなわち，質量全体に働いて体積が物理的パラメータとなり，宇宙生成の初期で V が t に比例する．量子効果の現れ方として，これは自然なことに思われる（量子重力の専門家の方には，ぜひ，上の推測の可否を調べて頂きたい）．

10.2.3 爆発する解を持つ確率微分方程式の平均場理論

ひとまず，宇宙の話から離れて，前節までのスケーリング理論の流れで，次の

ような一見物理的でないように思われる非線形確率微分方程式を考えてみよう：

$$\frac{dx}{dt} = \gamma x + gx^3 + \eta(t);\ \gamma > 0,\ g > 0. \tag{10.48}$$

これは，前節の式 (10.3) で非線形項の符号を「+」に変えただけの微分方程式であり，$\eta(t)$ は強さが ε の白色ガウシャンノイズである：

$$\langle \eta(t)\eta(t')\rangle = 2\varepsilon\delta(t-t'). \tag{10.49}$$

式 (10.48) を厳密に解くことはできないので，前節と同様に，式 (10.48) の両辺に x をかけてランダム平均をとり，εg が小さい極限（スケーリング極限）で成り立つ関係式 $\langle x(t)\eta(t)\rangle = 2\varepsilon$ を用いて，$y = \langle x^2\rangle_t$ の式を作ると

$$\frac{dy}{dx} = 2\left(\gamma y + gy^2 + \varepsilon\right) \tag{10.50}$$

となる．次に，この式の解の振舞いを調べてみよう．よく知られているように，この非線形常微分方程式は，有限の時刻 t_{c} で $y(t_{\mathrm{c}}) = \infty$ となる，いわゆる爆発する解を持つ．上の微分方程式は厳密に解くことができるが，解を見通しよくするため，スケーリング理論のときの取扱いと同様に εg が小さいとして，式 (10.50) を初期条件 $y(0) = 0$ で解くと，その解は

$$y = \frac{\frac{\varepsilon}{\gamma}\left(\mathrm{e}^{2\gamma t} - 1\right)}{1 - \frac{g\varepsilon}{\gamma^2}\left(\mathrm{e}^{2\gamma t} - 1\right)} \tag{10.51}$$

となる．この解は，$t = 0$ の近傍では t に比例して大きくなり，やがて指数関数的に増大し（$y \sim \mathrm{e}^{2\gamma t}$），

$$t_{\mathrm{c}} = \frac{1}{2\gamma}\log\left(\frac{\gamma^2}{g\varepsilon}\right);\ g\varepsilon \ll \gamma^2 \tag{10.52}$$

の時刻で $y = \infty$ となり爆発する．

宇宙のモデルでも，このような爆発する解を持つことが，パラメータによってあり得ることが知られている[10~13]．爆発したら，それで終りになるので，実際問題としては，式 (10.50) の右辺に負の高次の項，例えば，$-2hy^3$ のような項が加わって，爆発が抑えられるものと考えられる．実際，

$$\frac{dy}{dt} = 2\left(\gamma y + gy^2 - hy^3 + \varepsilon\right) \tag{10.53}$$

の解は，不等式 $\gamma h \ll g^2$ および $\varepsilon h^2 \ll g^3$ をみたす程度に h が小さいパラメータ領域に対して，時間 t が充分大きく，hy^3 の項が gy^2 と同程度になると，式 (10.53) の右辺 γy と ε の項は無視できて，

$$\frac{dy}{dt} = 2\left(gy^2 - hy^3\right) \tag{10.54}$$

と近似できる．この解は初期条件 $y(0) = y_0$ に対して，次の陰関数

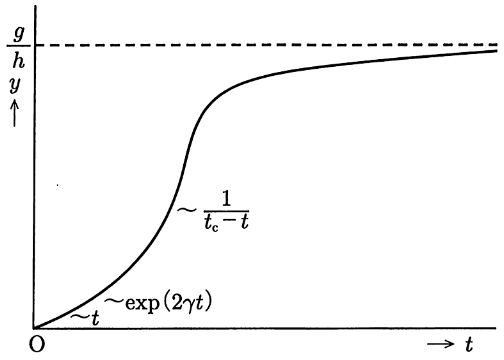


図 10.2　式 (10.53) の解の特徴的関数の移り変わり（模式図）: まず，巾乗 t から始まり，指数関数 $\exp(2\gamma t)$ になる．そして，**爆発解** $\frac{1}{t_c - t}$ になり，やがて一定値に近づく．

$$y = \frac{y_0 g}{g - 2g^2 y_0 t - h y_0 \log\left[\left(\frac{g}{y} - h\right) \Big/ \left(\frac{g}{y_0} - h\right)\right]} \tag{10.55}$$

で与えられる．以上まとめると，非線形微分方程式 (10.53) の解は，図 10.2 のように 4 つの特徴的な時間変化を示すことがわかる．すなわち，最初は，時間 t に比例して立ち上がり，次に指数関数的に大きくなり，さらに**爆発的な成長**をし，やがて一定値に近づく．

これは，宇宙の膨張を議論する際に一つのプロトタイプになるものと思われる．特に，宇宙のインフレーションからビッグバンへと変化する様子の現象論的な説明を与えているとみることもできるのではないだろうか．

10.2.4　インフレーションの時間スケーリング

宇宙の膨張，特にインフレーションに対して，秩序生成のスケーリング理論の立場から見ることにより，膨張初期の物理的メカニズムがわかり易くなる．すなわち，初期の膨張 $R \simeq (2kt)^{\frac{1}{2}}$ を与える係数 k は真空エネルギーの熱揺動に起因するものであり，初期時刻 $t = 0$ で，すでにゆらぎとして $R(0) \neq 0$ であったと考えるのと同じである．極めて小さい宇宙がゆらぎで生じてそれが大きく成長するというイメージが受け入れ易くなる．実際，式 (10.38) を初期条件 $S(0) \neq 0$ の下で解くと，

$$S(t) = (\varphi + S(0))\,\mathrm{e}^{2\chi t} - \varphi \tag{10.56}$$

となるから，パラメータ φ は，その後の指数的時間発展に対して初期値 $S(0)$ と同様の効果を与えていることがわかる．

このように，スケールすなわち共動球の半径 R の代わりにその表面積に対する変数 $S = R^2$ を用いることにより，すなわち，この変数変換によって，特異点を持つもとの非線形の微分方程式 (10.31) を，グローバルな精度良い近似で，

式 (10.38) のように線形化することにより，**宇宙膨張のメカニズムが直感的に**物理的に理解し易くなった．

全くの推測に過ぎないが，宇宙初期の量子重力効果を取り込み，宇宙膨張を記述するグローバルにスケルトナイズされた運動方程式は，共動球の体積 $V = R^3$ を用いて，式 (10.45) で表されると予想される．これによると，宇宙生成の初期では，V は t に比例し，したがって，スケール R は $t^{\frac{1}{3}}$ に比例する．

また，線形化された方程式に，さらに何らかの理由でプラスの非線形項 gS^2 や gV^2 が，式 (10.38) や式 (10.48) にそれぞれつけ加わると，解の爆発が起こる．これは，宇宙膨張がインフレーションから始まり，ビッグバンへと発展するシナリオ[11~14]を直観的にも受け入れ易くするものと思われる．

ハッブルの膨張率 H は，どの定式化でも，時刻 t が小さいとき，

$$H = \frac{\dot{R}}{R} = \frac{\dot{S}}{S} = \frac{\dot{V}}{V} \propto \frac{1}{t} \tag{10.57}$$

となり，$t \to 0$ で t に逆比例して $H \to \infty$ となることを指摘しておくことは興味深いことであろう．

今後，宇宙物理の研究が理論的にも実験的にもますます発展することを期待して筆を擱くことにする．

次章では，いろいろな物理系の変換・対応・等価性の効用について解説する．

参考文献

1) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 77, 477 (1976), および **57**, 380 (1977).
2) M. Suzuki and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **24**, 51 (1968).
3) M. Suzuki, *Adv. Chem. Phys.* **46**, 195–278 (1981).
頁 205, 式 (3.9) の左辺の 2ε は ε のミスプリント．また，式 (3.13) の右辺の $4\gamma\varepsilon$ は $4g\varepsilon$ のミスプリント．さらに，式 (3.14) の 1 行上の $\beta \simeq -\varepsilon/g$ は $\beta \simeq -\varepsilon/\gamma$ のミスプリント．以下の式に影響なし．
4) M. Suzuki, *Order and Fluctuations in Equilibrium and Nonequilibrium Statistical Mechanics*, Eds. Nicolis/Dewel/Turner (John Wiley & Sons, Inc., 1981).
5) 森口繁一，宇田川銈久，一松信，『数学公式集 I』，(岩波全書，1956，新装版：1987)．
6) 鈴木増雄，『統計力学』(岩波書店，2000)，岩波オンデマンドブックス (2016 年 1 月)．
7) S. ワインバーグ著，赤根洋子訳，大栗博司解説，『科学の発見』(文藝春秋，2016)，p.53 参照．
8) K. Sato, *Mon. Not. R. Astr. Soc.* **195**, 467 (1981).
9) A.H. Guth, *Phys. Rev. D* **23**, No.2, 347 (1981).
10) 『物理学辞典　三訂版』(培風館，2005)．
11) バーバラ・ライデン，牧野伸義訳，『宇宙論入門』(ピアソン・エデュケーション，2003)．
12) 江里口良治，『宇宙の科学』(東京大学出版会，1994)．
13) 日本物理学会会誌編集委員会，『物理学 70 の不思議』(日本物理学会，2016)．
14) 「Newton」2016 年 3 月号 (ニュートンプレス)，および，ニュートン別冊「インフレーション，パラレル宇宙論」参照．
15) M. Suzuki, *Proc. Japan Acad. Ser. B* (執筆中)．
16) 橋本幸士，量子重力理論「数理科学」2015 年 2 月号．
17) 川合光，重力の量子化と弦理論「数理科学」2015 年 12 月号．
18) 立川裕二，「量子重力の現状：私は如何にして心配するのを止めて弦理論を愛するようになったか」(東京大学物理教室談話会，2016 年 12 月 9 日)．講演スライドは http://member.ipmu.jp/yuji.tachikawa/transp/colloq.pdf で見られる．

第 11 章
物理系の変換・対応・等価性の効用

11.1 ニュートンの引力に関する定理，リー・ヤンの円定理および初等幾何の例

物理の様々な現象を扱う理論が変換・対応・等価性の視点で議論されることが最近多くなってきた．量子古典対応については，第 3 章ですでにスピン系を例に一通り解説した．また，前章では「秩序生成のスケーリング理論と宇宙膨張のインフレーションモデルとの対応」について説明した．本章では，古典力学における球形物体の引力に関するニュートンの定理[1)]から始めて，より一般的な変換・対応・等価性に向けて 2 次相転移に関するリー・ヤンの円定理と（変換による）その拡張について議論する．

11.1.1 物理学における歴史的な例——球形物体の引力に関するニュートンの定理

物理学の原点となっているニュートン力学に関する，実に独創的な名著『プリンシピア　自然哲学の数学的原理』の中に，すでに，変換・対応・等価性のすばらしい例が出てくる（本稿では中野猿人氏の訳[1)]を参考にした)．

よく知られているように，この本では，質量，運動量の定義から始まり，定義 VIII まで与えた後に，公理として，有名な運動の第 1 法則，第 2 法則，…とニュートン力学の基本的事項が述べられている．次に，第 1 編で物体の運動が詳しく論じられている．その中に次の内容の命題 71 定理 31 がある[1)]：

もし 2 つの質点の間に，その距離の 2 乗に逆比例する引力が働くならば，球面外に置かれた質点は，球の中心へ向かってその中心からの距離の 2 乗に逆比例する力で引かれる．

要するに，有限の大きさの球全体とその外にある質点との引力は，球の質量が球の中心に集中している場合の引力と同じになることを述べている．『プリン

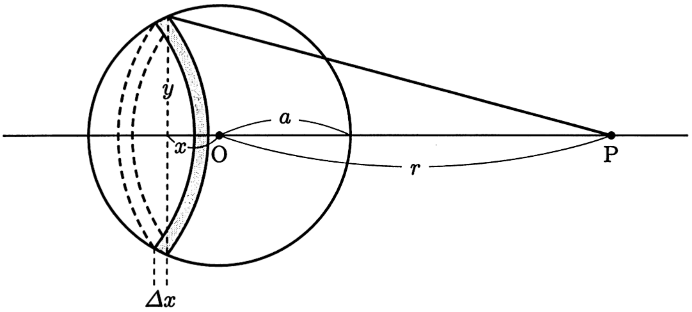


図 11.1　点 O を中心とする半径 a の球殻（中心 O から x と $x+\Delta x$ の距離にある帯状物体を $-a$ から a まで x で積分したもの）と点 P にある質点との重力の計算図.

シピア』では，初等幾何学の方法，すなわち，直角 3 角形の比例関係を用いて，これを証明している．面白いことに，ニュートン自身が発見した微分法は用いられていないが，実質的にそれと同等な極限操作が行われている．

これを今風に微積分法を用いて説明すると次のようになる．図 11.1 のように，半径 a の球面上（厚さの極めて薄い球殻）の帯状物体の全体と球の中心 O から r だけ離れた点 P にある質量 m との，$\overline{\mathrm{OP}}$ 軸に平行な引力 $\Delta f(a,r)$ をまず求める．帯状物体は，球の中心から x だけ離れているとすると，その半径 y は $y=(a^2-x^2)^{\frac{1}{2}}$ で与えられ，その長さは $2\pi y$ となり，その微小幅 dl は

$$dl=\left(1+\left(\frac{dy}{dx}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}}dx=\frac{adx}{y} \tag{11.1}$$

となる．したがって，帯状全体の微小面積は dS は

$$dS=2\pi y\cdot\frac{adx}{y}=2\pi adx \tag{11.2}$$

となり，x によらなくなる（この初等幾何学的な導き方[2]については補遺を参照してほしい）．次に，球殻上の単位面積・単位厚さ当りの密度を ρ とすると，求める微小引力 $\Delta f(a,r)$ は，$\overline{\mathrm{OP}}$ 軸への射影比を考慮して，

$$\Delta f(a,r)\to df(a,r)=\frac{Gm\cdot 2\pi a\rho dx}{(r+x)^2+y^2}\cdot\frac{r+x}{((r+x)^2+y^2)^{1/2}} \tag{11.3}$$

で与えられる．ただし，G は重力定数である．

したがって，球殻全体と点 P の質点 m との引力の大きさ $f(a,r)$ は，$y^2=a^2-x^2$ より，次の積分

$$f(a,r)=\int_{-a}^{a}\frac{Gm\cdot 2\pi a\rho(r+x)}{(a^2+r^2+2rx)^{\frac{3}{2}}}dx \tag{11.4}$$

で与えられる．点 P が球の外側にあるという条件（すなわち，$r>a$）の下では，上の積分は

$$f(a,r) = Gm \cdot \frac{4\pi a^2 \rho}{r^2} \tag{11.5}$$

と求められる．さらに，これを球の半径 a 方向に積分することにより，球と質点 m との引力 F は

$$F = G\frac{mm'}{r^2};\ m' = \frac{4\pi}{3}a^3\rho \tag{11.6}$$

で与えられることになる．こうして，命題 71 定理 31 が積分法を用いて示される．

このように，積分法による証明法を詳しく説明したのは，もう一つ理由がある．点 P が球殻の中にあるとき（すなわち，$r < a$ のとき）も，上の積分式 (11.4) は有効であり，この場合には，

$$f(a,r) \equiv 0;\ r < a \tag{11.7}$$

となる（それは，不定積分に現れる無理式 $(a^2 + r^2 + 2rx)^{\frac{1}{2}}$ の中に，積分の下限 $x = -a$ を入れた表式 $\left((r-a)^2\right)^{\frac{1}{2}}$ が $(a-r)$ となるためである）．すなわち，質点 m は球殻の中では力を受けない．これも，『プリンシピア』では，命題 70 定理 30 として述べられており，初等幾何学の方法，すなわち，比例式だけを用いて，点 P と双対関係にある球殻上の 2 つの重力が互いに打ち消し合って球殻の質点 m に働く合力は零になることが見事に証明されている．

以上の結果は，それらの証明からわかるように，球全体が一様な密度である必要はなく，球殻内ごとに一様な密度であれば，球殻ごとに密度が変化しても成り立つ．条件としては，回転対称性があればよい．

さて，このように，球の引力はその中心に全質量が集中している物体の引力と等しいことがわかると，球と球との引力も，それぞれの中心にそれぞれの球の全質量が集まっている 2 つの質点間の引力に等しくなる（『プリンシピア』の定理 31 から定理 36 までの命題．初版が出版される前年の 1685 年発見）．この定理により，多くの天体間の引力と相互の運動が力学的に研究されるようになった．

11.1.2 強磁性イジング模型の相転移に関するリー・ヤンの円定理とその拡張

前項では，空間的対称性をうまく利用する変換の効用を説明した．この項では，内部自由度であるスピン間の相互作用の対称性に着目して，その自発的破れと物理量の特異点の出現に関する古典的なリー・ヤンの円定理[3]，さらにその量子スピン系への拡張について解説する．

(i) リー・ヤンの円定理

自然現象の中でも極めて興味深い相転移現象は熱力学的状態の対称性の変化として捉えられる[4,5]．特に，2 次相転移は，強磁性や超伝導でみられるように，磁化率などの応答関数（自由エネルギーの 2 階微分）に異常性を示すため，数

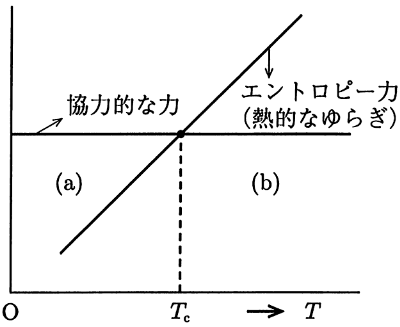


図 11.2　2 次相転移のメカニズムの様式図[6]：(a) 秩序状態（対称性の破れた状態），(b) 無秩序状態（対称性の高い状態）．協力的な力とエントロピー力とがつり合ったときの温度が相転移点（臨界点）T_c となる．

理的にも大変興味深く，多くの研究がなされてきた．一般に，相互作用が何らかの対称性，例えば，**スピン反転対称性**を持っているとき，その対称性を破るような外力（磁場など）を加えると，対称性の低い秩序状態（磁化した状態）が，いわば強制的に現れる．高い温度では，この外場を取り除くと，熱的なゆらぎにより無秩序状態に戻り，対称性が回復する．低温になると，協力的な相互作用の効果が体系全体に波及して，外場なしで自発的に対称性が破れる．こうして，ある転移温度 T_c を境目にして 2 次相転移が起こる．これをわかり易く模式的に示すと，図 11.2 のようになる．言い換えると，外場が零のときにのみ，熱力学的な量に特異性が現れる．すなわち，自由エネルギーに特異点が存在し，強磁性体では，磁化率が T_c で発散する．これを強磁性イジング模型でリーとヤンが初めて数学的に厳密に証明した．その証明の基礎となったものが次のリー・ヤンの円定理である[3,7]．

リー・ヤンの円定理：強磁性イジング模型

$$\mathscr{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \mu_B H \sum_j S_j;\ J_{ij} \geq 0;\ S_j = \pm 1 \tag{11.8}$$

に対する状態和

$$Z(z) = \sum_{\{S_j=\pm 1\}} \exp\left(\beta \sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j\right) \prod_j z^{S_j} \tag{11.9}$$

の零点はすべて複素 z-平面の単位円周上にある．ただし，変数 z は $z = \exp(\beta\mu_B H)$ で定義されるフーガシティである．また，β は温度 T とボルツマン定数 k_B を用いて $\beta = 1/k_B T$ で定義される．

これを完全に証明するのはここでは省略して，その要点のみ説明することにする．上の定理は任意の数のスピンに対する命題であるから，一番簡単な 2 個のスピン系で定理の成立するカラクリをまず調べてみよう．上の模型を少し一

般化して，スピン S_j には H_j の磁場がかかるとし，それに対応して，各スピン S_j ごとにフーガシティ $z_j = \exp(\beta\mu_B H_j)$ を定義する．この場合における 2 個のスピン系の状態和 $Z(z_1, z_2)$ は容易に

$$Z(z_1, z_2) = \mathrm{e}^K \left(z_1 z_2 + \frac{1}{z_1 z_2} \right) + \mathrm{e}^{-K} \left(\frac{z_1}{z_2} + \frac{z_2}{z_1} \right) \tag{11.10}$$

と求まる．ただし，$K = \beta J_{12} > 0$ である．そこで，$Z(z_1, z_2) = 0$ として，z_1 と z_2 の関係式を求めると，$a = \mathrm{e}^{2K}$ とおいて，z_2^2 は z_1^2 の双 1 次式で与えられる．その絶対値をとると，

$$|z_2|^4 - 1 = -\frac{(a^2 - 1)\left(|z_1|^4 - 1\right)}{|a z_1^2 + 1|^2} \tag{11.11}$$

となる．強磁性相互作用 $J_{12} > 0$ の条件の下では，$a^2 - 1 > 0$ であるから，式 (11.11) より，$|z_1| \geq 1$ ならば，$|z_2| \leq 1$ となる．スピン 2 のフーガシティ z_2 が複素平面の単位円の外側にあれば，z_1 は内側になる．したがって，一様磁場 $H_1 = H_2 = H$，すなわち，$z_1 = z_2 = z$ に対する零点は，$|z| = 1$ となり，単位円周上にある．また，この場合のスピン相関は，$\langle S_1 S_2 \rangle$ は

$$\langle S_1 S_2 \rangle = \tanh K = \frac{a-1}{a+1} > 0 \tag{11.12}$$

で与えられるから，リー・ヤンの円定理の成立条件とグリフィスの第 1 不等式[8] $\langle S_i S_j \rangle > 0$ とは対応している．上の議論は，スピンの数 N が 3 以上の一般の場合にも，帰納法的に拡張することができる[3,7]．

こうして，強磁性体では，スピン相関がすべて正であるというごく自然な物理的性質が数学的なリー・ヤンの円定理に反映されている．その結果，$F = -k_B T \log Z(z)$ で与えられる自由エネルギーの特異点は，正の実軸上では，$z = 1$ のみとなり，$H = 0$ のときにのみ，F に特異性が現れ，2 次相転移が起こることになる．反強磁性体などでは，この条件が破れるから，リー・ヤンの円定理は成り立たず，有限の $H (\neq 0)$ に対して相転移が起こり得る[4]．

(ii) 高スピンの強磁性イジング模型への拡張

(i) の議論を高いスピン S の場合に拡張しようとすると，$S = 1$ ($S_j = 1, 0, -1$) で $N = 2$ の場合でも，

$$\begin{aligned} Z(z_1, z_2) = {} & \mathrm{e}^K \left(z_1 z_2 + \frac{1}{z_1 z_2} \right) + \mathrm{e}^{-K} \left(\frac{z_1}{z_2} + \frac{z_2}{z_1} \right) \\ & + \left(z_1 + z_2 + \frac{1}{z_1} + \frac{1}{z_2} + 1 \right) \end{aligned} \tag{11.13}$$

となり，条件 $Z(z_1, z_2) = 0$ をみたす z_1 と z_2 の関係式，すなわち，z_2 から z_1 への変換式は複雑になる．それでも何とか，スピン $S = \frac{3}{2}$ $\left(S_j = \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{3}{2}\right)$ までは，リー・ヤンの証明法が拡張できる[9,10]．しかし，この方法では，S が 2 以上に対しては，現在でも拡張に成功した人はいない．

グリフィスは，全く別の方法で，一般の高いスピンの強磁性イジング模型に対してもリー・ヤンの円定理が成り立つことの証明に成功した[11]．その証明方法は，筆者が別の問題で導入した**ゴースト（仮想的）スピン（相互作用）**の概念[12]を用いて，高いスピン系の状態和を通常の $S=\frac{1}{2}$ のイジング模型の状態和に変換し，もとのリー・ヤンの円定理を利用することである．グリフィスのアイデアを，ここでは，スピン S が $S=1$ の場合について説明する．この場合には，j スピンの成分 $S_j(=\pm1,0)$ を 2 つのゴーストスピン $\sigma_{j1}(=\pm1), \sigma_{j2}(=\pm1)$ の和として，$S_j=\sigma_{j1}+\sigma_{j2}$ のように表す．このままでは，$S_j=0$ の状態が $\sigma_{j1}=-\sigma_{j2}=\pm1$ に対応して 2 重に数えられてしまい，もとの高いスピン系には対応しない．そこで，**ゴーストスピン相互作用**すなわち，σ_{j1} と σ_{j2} の間に仮想的相互作用を導入して，この 2 重の状態のそれぞれの出現率を他の半分になるように**ゴースト（仮想的）ボルツマン因子**を構成し，それを次のように，もとのボルツマン因子にかけて，$\{\sigma_{jk}\}$ で和をとることにする：任意の関数 $f(S_j,\cdots)$ に対して，次の変換（**グリフィス変換**）

$$\sum_{S_j=\pm1,0} f(S_j,\cdots)=\sum_{\sigma_{jk}=\pm1} f(\sigma_{j1}+\sigma_{j2},\cdots)\mathrm{e}^{\lambda\sigma_{j1}\sigma_{j2}+\mu} \qquad (11.14)$$

を行う．ただし，$\lambda=-\mu=\frac{1}{2}\log 2>0$ である．こうして，もとの高いスピン（$S=1$）の強磁性模型は，通常の（2 値のみをとる）強磁性イジングスピン模型に変換される．

これは，リー・ヤンの円定理の条件（強磁性相互作用）をみたしており，定理が高いスピン（$S=1$）の系に拡張されたことになる．このようなグリフィス変換は，一般の高いスピンにも容易に拡張できるが[11]，ここでは省略する．

(iii) 量子スピン系へのリー・ヤン定理の拡張

スピンが $\frac{1}{2}$ の**ハイゼンベルグ模型** $\mathscr{H}=-\sum_{i,j}J_{ij}\boldsymbol{S}_i\boldsymbol{S}_j-\mu_{\mathrm{B}}H\sum_j S_j^z$ に対しても，拡張されたトロッター公式を用いて，強磁性イジング模型に変換することにより，リー・ヤンの定理が成り立つことが示される[7,13]．

スピンが高い強磁性ハイゼンベルグ模型に対しては，前項と少し類似して，一般のスピン演算子 $\boldsymbol{S}$ をスピン $\frac{1}{2}$ の演算子 $\{\boldsymbol{s}_j\}$ で $\boldsymbol{S}=\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2+\cdots+\boldsymbol{s}_{2S}$ と和で表し，$\boldsymbol{S}^2=S(S+1)$ だけのもとのスピン空間に射影変換 P を行う[14]：

$$P=\lim_{\lambda\to\infty}\exp\left[-\lambda\left(S(S+1)-(\boldsymbol{s}_1+\boldsymbol{s}_2+\cdots+\boldsymbol{s}_{2S})^2\right)\right]. \qquad (11.15)$$

この変換も，ゴーストスピンで $\{\boldsymbol{s}_j\}$ が互いに強磁性的相互作用で結合している形になっているので，筆者のこの変換[14]によって，スピンの高い強磁性模型がスピン $\frac{1}{2}$ の強磁性ハイゼンベルグ模型に変換され，やはりリー・ヤンの円定理が成り立つことがわかる．

力学の原典である『プリンシピア』における変換・対応・等価性の例から，2 次相転移の理論で基本的な役割を果たすリー・ヤンの円定理とその拡張につい

て解説し，それらの効用を説明した．次節以降では対称性のより高いスピン相互作用（例えばゲージ不変な4体力イジング模型）などを持つ系の物理的特徴を変換・対応・等価性の視点から議論する．本節で簡単にふれた「ゴーストスピン（相互作用）」[12]や「トポロジー変化法」[15]なども議論する．

補遺：初等幾何学における興味深い変換・等価の例

(i) 球の表面積と円柱の側面積との等価性

『プリンシピア』のように，初等幾何学の方法を用いて球の面積や表面積を議論するほうが直観的でわかり易い[2]．

まず，図11.3のように，半径 r の球の中心Oから x だけ離れた帯状の曲面を考える．その半径 y は，$y = (r^2 - x^2)^{\frac{1}{2}}$ で与えられる．また，直交する2つの直線の傾き m, m' の積は $mm' = -1$ となるから，円に接する直線の傾き $\Delta y/\Delta x$ は，$\Delta y/\Delta x = -x/y$ となる．したがって，帯状の微小面積 ΔS は，

$$\Delta S = 2\pi y \cdot \sqrt{(\Delta x)^2 + (\Delta y)^2} = 2\pi y \cdot \left(1 + \left(\frac{\Delta y}{\Delta x}\right)^2\right)^{\frac{1}{2}} \Delta x$$

$$= 2\pi y \left(1 + \frac{x^2}{y^2}\right)^{\frac{1}{2}} \Delta x = 2\pi r \cdot \Delta x \tag{11A.1}$$

となるから，図11.3の円柱の対応する微小側面の面積と等しくなる．これは，面白いことに，高さによらず一定である．こうして，球の表面積 S は同じ半径 r，高さ $2r$ の円柱の側面積 $4\pi r^2$ と等しくなる（$S = 4\pi r^2$）．

(ii) 錐体の体積公式の初等的・直観的導き方

3角錐・4角錐・…や円錐などの錐体の体積 V は，底面積 S と高さ h の積の $\frac{1}{3}$ で与えられる（$V = \frac{1}{3}Sh$）が，この公式の導出法は古来いろいろと工夫されてきた．V が S と h に比例することは自明であるが，その係数が $\frac{1}{3}$ になることを示すことがここでの問題である．以前筆者の考案した，係数 $\frac{1}{3}$ の直観的な証明法[2]をまず紹介しよう．

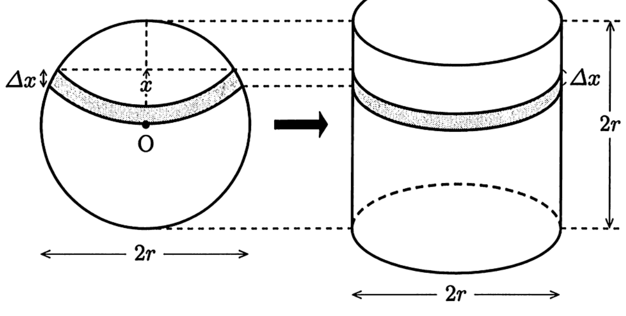


図11.3 球面上の帯状の面積と等しい円柱側の微小面積 $2\pi r \cdot \Delta x$．これより球面の面積 S は $S = 2\pi r \cdot 2r = 4\pi r^2$ と求まる．

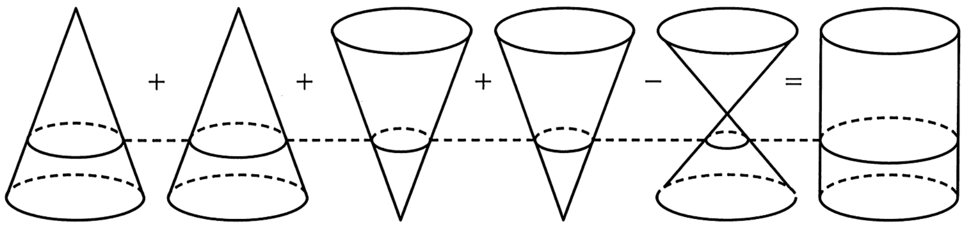


図 11.4 錐体の体積の公式に現れる係数 $\frac{1}{3}$ を直観的に導く等価図[2]．底面積 S と高さ h の錐体の体積を $V = kSh$ とおくと，上の等価図より，$4V - V = 3kSh = Sh$（柱状の筒の体積）より，$k = \frac{1}{3}$ が導かれる．

4 つの合同な任意の形の錐体と，それを半分の高さにした 2 つの錐体を頂点を共通に鼓の形に向き合わせたものとを図 11.4（簡単のために円錐を用いた）のように配列する．高さが x のところの断面積の合計を求めると，相似図形の比例式を利用して，

$$\left\{2\left(\frac{h-x}{h}\right)^2 + 2\left(\frac{x}{h}\right)^2 - \left(\frac{\frac{h}{2}-x}{\frac{h}{2}}\right)^2\right\}S = S \tag{11A.2}$$

となる．すなわち，同形の底面の柱体の断面積と，すべての x に対して等しくなる．こうして，1 つの錐体の体積は $\frac{1}{3}Sh$ となることが初等的に示される[2]．

(iii) 球の体積と円錐の体積との直観的な関係

通常よく用いられる直観的な説明としては，まず球面を極めて小さな 3 角形に分割して，それぞれの 3 角形を底面とし，球の中心を頂とする 3 角錐を用いて球全体を分割する．極限操作を認めるならば，球の体積 V はこれら分割した円錐の体積の総和で表されることになる．したがって，V は

$$V = \frac{1}{3}\left(\text{球の表面積}\right) \times \left(\text{球の半径}\right) = \frac{4\pi r^3}{3} \tag{11A.3}$$

となる[2]．

別の興味深い，球の体積の公式の直観的な導き方としては，次の方法がある．すなわち，図 11.5 のように，半径 r，高さ r の円柱から，半径 r の半球を切り抜いた臼状立体と，同じ半径 r，高さ r の円錐とを比較し，同じ高さの切り口の断面積がいつも等しくなることを用いる．こうして，半球の体積 $\frac{1}{2}V$ は次のように初等的に求まる：

$$\frac{1}{2}V = \left(\text{円柱の体積}\right) - \left(\text{円錐の体積}\right) = \pi r^3 - \frac{1}{3}\pi r^3 = \frac{2}{3}\pi r^3. \tag{11A.4}$$

これは，積分法による解析的な計算

$$\frac{1}{2}V = \int_0^r \pi y^2 dx = \pi r^2 \int_0^r dx - \pi \int_0^r x^2 dx = \frac{2}{3}\pi r^3 \tag{11A.5}$$

の初等幾何学的説明を与えており，直観的にわかり易い『プリンシピア』的記述になっていることを強調しておきたい．

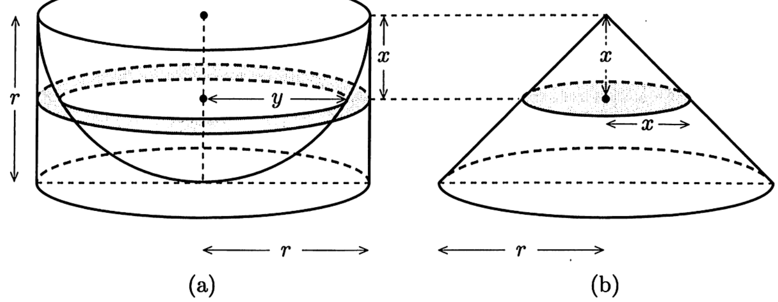


図 11.5　半球の体積と円錐の体積が 2 : 1 になる直観的な説明．半径 r，高さ r の円柱から半球（半径 r）を切り抜いた残りの臼状の立体と円錐 (b) は同じ高さの切り口の面積が等しくなる．このことと，ガバリエリの定理より 2 つの立体の体積は等しくなる．

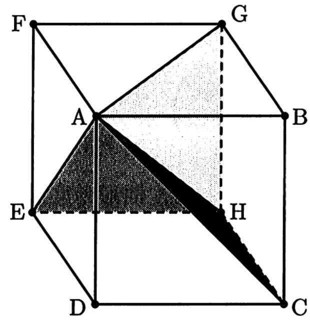


図 11.6　立方体を 3 つの合同な 4 角錐（ACDEH, ABCHG, AEFGH）に分割．これにより，1 つの 4 角錐の体積は立方体 ABCDEFGH の $\frac{1}{3}$ であるがわかる．分割のキーポイントは対角線 $\overline{\mathrm{AH}}$ を 3 つの 4 角錐のそれぞれ 1 つの辺となるようにすることである．

(iv) 直方体を 3 つの等積の 4 角錐に分割する方法

今までの直観的変換・等価性の議論では，無限小の概念を用いて無限に多くの量の和をとるという極限操作を利用している．ガバリエリの定理もこれを前提にしている．ニュートンも『プリンシピア』において，自身の発明した「流率法」(＝微分法）をあらわには用いていないが，本質的には極限操作を用いて証明していることになる．

ここでは，極限の概念を用いずに角錐の体積が求められる面白い例を紹介しよう．図 11.6 に示すように，立方体は 3 つの合同な 4 角錐に分割できる．分割のキーポイントは，立方体の対角線 $\overline{\mathrm{AH}}$ を 1 つの共通の辺とするように 3 つの 4 角錐を “切り出す” ことである．これより明らかに，1 つの 4 角錐は，同じ正方形を “底面” とする立方体の体積の $\frac{1}{3}$ となる．

この議論は直方体にも容易に異方的スケール変換により拡張できる．もとの単位立方体の各辺を a 倍，b 倍，c 倍に引き伸ばすと，すべて abc 倍され同じ体積となることがわかる．こうして，3 つの辺が直角な 3 角錐の体積がもとの直

方体の体積の $\frac{1}{3}$ であることが，ごく初等的に導ける．

本章の執筆にあたり，『プリンシピア』を読み，その力学の初等幾何学的，かつ美しい体系的記述に感激した．それと同時に**ヒポクラテスの格言**を思い出した．以下はそのラテン語訳（原文はギリシャ語）である．

Ars longa, vita brevis.（学芸は長く，生涯は短し．）

11.2 ゴーストスピン相互作用，相関等式およびくり込み

物性物理学における極めて興味深い相転移・臨界現象に関して，ノーベル賞受賞者も含む多くの人々によって目覚しい研究が行われてきた．その中には，ファン・デア・ワールスの気相–液相転移の理論，ネールの反強磁性理論，ランダウの 2 次相転移の現象論，オンサーガーの 2 次元イジング模型（磁場なし）の厳密解，ヤンの 2 次元の自発磁化の厳密解，ド・ジャンヌの液晶理論，ウィルソンのくり込み群の理論，コスタリッツとサウレスの KT 転移などがある．

11.2.1 相転移に関するバテレ会議に参加して

1970 年 9 月 7 日～12 日にスイスのジュネーヴとグスタードで開催された国際会議[16)]では，招待のみの参加者約 60 人くらいで活発な議論が行われ，L. オンサーガー，C.N. ヤン，L. ファン・ホーヴェ，M. キャッツ，L. カダノフ，B. ジョセフソン，G. ジョナラシニオなどの講演を，当時 30 代前半だった筆者は幸運にも直接聞く機会に恵まれ，生涯忘れられない経験をした．なかでも，ローマ大学のジョナラシニオの「くり込み群と相転移の理論」という講演は，その内容が完全に理解できたわけではなかったが，他の講演とは異質で強烈に強い印象を受けた．会議の合間に彼に熱心に質問をした．院生のときに梅沢博臣先生の場の理論におけるくり込み理論を聞いたことがあったが，それがまさか自分の分野の相転移・臨界現象のスケーリング則や臨界指数の導出に役立つとは思いも寄らなかったので大変新鮮な感動を覚えた．（彼との熱い議論がきっかけとなり，その後毎年のようにローマ大学に招かれ，彼の共同研究者[17)]の C. ディキャストロ氏等と交流を深めることができた．1971 年には臨界現象に関する本格的なくり込み群の理論が K. G. ウィルソン[18)]によって発表されたことは，よく知られている通りである．）

また，外国の著名な研究者と個人的に議論することができたことも筆者にとっては大きな収穫であった．臨界緩和現象を理解するにはファン・ホーヴェの現象論（緩和時間が平衡磁化率で記述されるとする理論）では不充分であり，動的臨界現象に固有な臨界指数の存在が本質的であるという筆者の新説[16, 19)]をオンサーガーに前もって話をしたところ，そのメカニズムの直観的な説明を求められ困った記憶がある．本会議でも同様の質問を他の参加者から受けた[16)]．この

質問にきちんと答えるのは今でも難しいが，高温度展開法による我々の上記の説[19]はその後動的くり込み群の理論によって確認されている[4,20]（補遺参照）．

さらに，会議初日ヤンにリー・ヤンの円定理の量子スピン系への拡張[7]の話をしたら，これも本会議で講演できるよう特別に取り計らってくれた[16]．この円定理の物理的意義の一つは，前節で説明した通り，強磁性系では外場が零のときにのみ自由エネルギーに特異性が現れることを保証することである（これはほとんど自明なことである）．もう一つこの円定理を取り上げる理由は，挑戦的課題である「**非自明な系の状態方程式を厳密に求めること**」，すなわち，

外場のある系の厳密解を求めること

と，**リー・ヤンの円定理**が深いところで繋がっていると思われるからである．これに関連した質問が，筆者の講演の後で出され，ヤンが次のようにコメントをした[16]：解析関数の特異点の位置が分かったからと言ってその関数のダイナミクス（外場のある場合の振舞い）が分かると考えるのはあまりにも楽観的過ぎる．

実際，リーとヤンの論文[3]には，温度T，偏角θにおける零点の分布関数$g(\theta,T)$まで分かれば自由エネルギーが求められる公式が示されている．（この公式を用いて，系のスケーリング則も議論されている[21,22]．また，$T < T_{\rm c}$での自発磁化$m_{\rm s}$は$m_{\rm s} = 2\pi\mu_{\rm B}g(0,T)$で与えられる[22]．）現在までのところ，この分布関数を解析的に求めることに成功したものはいない．

そこで，本節では磁場のあるときの解を求める別な方法，すなわち，ゴーストスピン（相互作用）の方法をまず詳しく解説する．

11.2.2　ゴーストスピン（相互作用）の方法

前節でリー・ヤンの円定理を一般のスピンのイジング模型に拡張する際に用いたゴーストスピンの概念のもとになった論文[12]の解説から始める．

磁場Hが零でない系のハミルトニアンは，磁場Hの反転$H \to -H$に対して対称性が破れるので，一般に解析的な取扱いが難しくなるように思われる．そこで，まず余分の（ゴースト，または仮想的）自由度（スピン）を導入し，もとの系との間にゴースト相互作用をつけ加えることにより，全体のスピン反転対称性を回復させて状態和を求める．その後で，ゴーストスピンを消去することにより，もとの系の状態和を求めるのが，「**ゴーストスピン（相互作用）**」の方法である．

最初に断っておくが，この方法で例えば2次元の磁場のある問題が厳密に解けるわけではない．このゴーストスピン（相互作用）の概念は，前節でも用いた如く，統計力学の重要な問題，例えば，スピングラスの理論などに陰に陽に利用されてきた経緯もあり[12]，大変有用であると思われる．

図11.7のように，磁場Hのあるスピン系をA-格子とし，そのスピン相互作

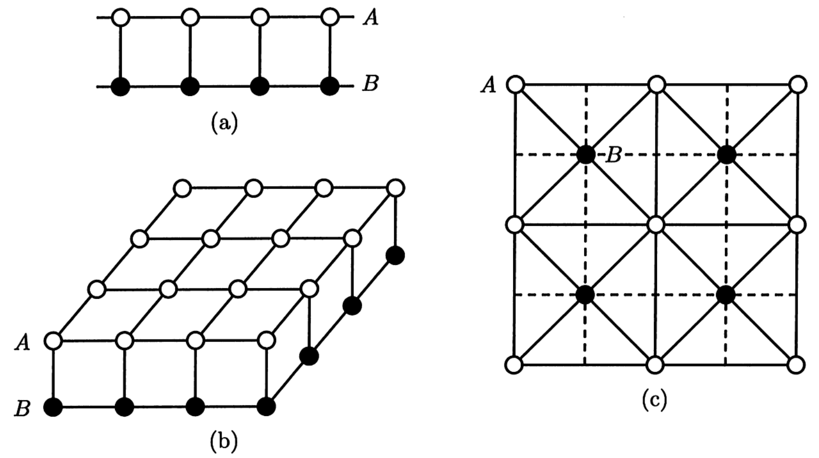


図 11.7　(a) 1 次元の格子，(b) 2 次元の 2 層格子，(c) 2 次元のクロスボンド（破線で表した相互作用）の格子[12)]．○印，●印はそれぞれ，磁場 H のあるスピン系（A-格子），ゴーストスピン（B-格子）を表す．

用を J_A で表す．$K_A = J_A/k_{\rm B}T$ とおいて，この系の状態和を $Z(K_A, H)$ と書くことにする．

これに対応するゴーストスピン系を B-格子とし，A-格子に対応する変数をそれぞれ $J_B, K_B = J_B/k_{\rm B}T$，また A-格子と B-格子間のゴーストスピン相互作用を J_{AB} とする．さらに $K_{AB} = J_{AB}/k_{\rm B}T$ とおいて，A-格子と B-格子の合成系の状態和を $Z(K_A, K_{AB}, K_B)$ で表す．もとの系が磁場なしのときスピン反転対称性を持っている（例えば 2 体力である）とすると，もとの磁場 H を持つ系の状態和 $Z(K_A, H)$ は次の公式で与えられる[12)]：

$$Z(K_A, H) = \lim_{K_B \to \infty} \left[\frac{1}{Z(K_B)} Z\left(K_A, \frac{\mu_{\rm B} H}{k_{\rm B}T}, K_B \right) \right]. \qquad (11.16)$$

強磁性イジング模型（スピン $\frac{1}{2}$）では，基底状態は 2 重縮退しており，スピン S_B はすべて 1 か -1 である．したがって，式 (11.16) の極限 $K_B \to \infty$（$T \to 0$ または $J_B \to \infty$）では，ゴーストスピンの値は，すべて $S_B = 1$ またはすべて $S_B = -1$ であり，**ゴーストスピン相互作用** $-J_{AB}S_AS_B$ はすべて $-J_{AB}S_A$（または，すべて $+J_{AB}S_B$），すなわちゼーマン項 $-\mu_{\rm B}HS_A$（または，$+\mu_{\rm B}HS_A$）に変換される．いずれにしても，もとの系が磁場なしのときにスピン反転対称性を持っているので，状態和 $Z(K_A, H)$ は H に関して偶関数であり，式 (11.16) が成り立つことになる．

この**ゴーストスピン相互作用**のカラクリを例示するために，簡単に解ける 1 次元スピン系を取り扱ってみる．図 11.7(a) のように合成系は 2 列の格子系となり，有限幅の 2 次系になる．却って複雑な系に変換されたように見えるが，実は，4×4 の転送行列が中心対称性を持っており，この系の固有値問題は 2×2 の行列式（の積）に帰着される[12)]．こうして，容易に，

$$Z(K_A, K_{AB}, K_B) = 2\Big[\cosh(K_A + K_B)\cosh K_{AB}$$
$$+ \Big\{\cosh^2(K_A + K_B)\cosh^2 K_{AB} - \sinh 2K_A \sinh 2K_B\Big\}^{\frac{1}{2}}\Big] \qquad (11.17)$$

が得られる．これより，公式 (11.16) を用いて，もとの磁場ありの系の状態和 $Z(K_A, H)$ は

$$Z(K_A, H) = \mathrm{e}^{K_A}\Big[\cosh h + \big(\sinh^2 h + \exp(-4K_A)\big)^{\frac{1}{2}}\Big] \qquad (11.18)$$

となる．ただし，$h = \mu_{\mathrm{B}}H/k_{\mathrm{B}}T$ である．もちろん，この結果は，最初から，もとの 1 次元スピン系に転送行列法を用いて解く方がより簡単に得られる[4)]．

同様にして，多くの人々が挑戦してきた 2 次元磁場ありのイジング模型を解く問題[16)]は，図 11.7(b) のような高さが 2 の 3 次元磁場なしイジング模型の問題と等価であることがわかる．

上の議論の中に大変興味深い歴史的な話が含まれている．それは，磁場なしの 2 列（図 11.7(a)）のイジング格子系の転送行列（4×4）が 2×2 の行列式の固有値問題に帰着されることである．これに気づいたオンサーガーは 3 列の場合にもうまい変換により，同様に 2×2 の行列式に変換できることを発見し，遂に，一般の 2 次元イジング模型の厳密解を求めることに成功したようである[16)]．

図 11.7(c) のような一見すると 2 次元模型とも思えるものにゴーストスピンをはめ込むことができるが，この模型では相互作用が互いにクロスしており，トポロジー的には 3 次元的であり，現在のところ厳密に解くことはできない．

このように，非可解模型を変換しても，やはり非可解であることには変わりはないが，定式化が変わるとその扱い方に新しい側面が出てくる可能性はある[23,24)]．

以下の定式化[12)]では，スピン間の相互作用は簡単のために強磁性的である場合を扱っているが，より一般に $-J_{ij}S_iS_j$ の形の相互作用の値 J_{ij} が正・負含めたランダムスピン系，特にスピングラスにまで拡張できる[23)]．スピングラス相に等価なランダムオーダー相（ROP）[25)]もゴーストスピンとの相関の出現した相として捉えることができる．

11.2.3 平衡無限系の定式化と相関等式

平衡統計力学では，粒子数 N が巨視的に大きい系を扱う．相転移・臨界現象は $N \to \infty$ で起こる．そこで，最初から $N \to \infty$ の系（無限系）を取り扱うことが有効と考えられる．しかし，温度 T の平衡系の統計集団を記述するギブス分布関数 ρ は，系のハミルトニアンを $\mathscr{H}$ とすると，

$$\rho = \frac{\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}}{Z(\beta)};\ Z(\beta) = \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}} \text{ および } \beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}T} \qquad (11.19)$$

で表されるが，$N \to \infty$ では，ほとんどの場合 $\mathscr{H}$（またはその固有値）は $\pm\infty$ になるから，ρ を定義することができなくなる．

系のサイズ N が有限でも無限でも成り立つ関係式を用いて物理現象を扱う基

礎となる公式が，これから説明する相関等式である．要するに，これは，全系のエネルギーを表すハミルトニアンを直接使わず，局所的な相互作用のみを用いてあらゆる相関関数を導く基本的な手続きを与えるものであり，分布関数 ρ と等価である：

$$\text{分布}\,\rho \Longleftrightarrow \text{相関等式の全体}. \tag{11.20}$$

この仕組みをわかり易く説明するために，スピン $\frac{1}{2}$ の通常のイジング模型についてまず考える．そのハミルトニアン $\mathscr{H}$ は

$$\mathscr{H} = -\sum_{i,j} J_{ij} S_i S_j - \mu_{\mathrm{B}} H \sum_j S_j;\ S_j = \pm 1 \tag{11.21}$$

と表されるとする．歴史的には，グリーン関数の方法で H.B. キャレン[26]は，次の等式を導いた：

$$\langle S_j \rangle = \left\langle \tanh \left[\beta \left(\sum_k J_{jk} S_k + \mu_{\mathrm{B}} H \right) \right] \right\rangle. \tag{11.22}$$

すなわち，任意の格子点 j のスピンの平均値 $\langle S_j \rangle$ は，その S_j と相互作用 J_{jk} で結合しているスピン $\{S_k\}$ との多体スピン相関で表される．この等式は磁場 H が任意の値に対して厳密に成り立つ公式であり，スピン系の状態方程式を議論するのに有効である[27~29]．明らかに，上の等式には，全系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ は，あらわに含まれていないので，最初から無限系に上の等式を適用することができ，臨界現象を扱うのに便利である[26~29]．

実は，キャレンの等式 (11.22) を特別な場合として含む次の一般的な相関等式が導出されている[27~29]．

相関等式：イジング模型のような可換系（古典系）で，共通の変数を含まない 2 つの関数 f と g の**相関関数** $\langle fg \rangle$ を考える．さて，系のハミルトニアン $\mathscr{H}$ を，g に含まれる変数（g 変数）を含む部分ハミルトニアン $\mathscr{H}_g$ とそれ以外の部分 $\mathscr{H}'$ に分ける：$\mathscr{H} = \mathscr{H}_g + \mathscr{H}'$．このとき，$\mathscr{H}_g$ に関してのみ部分トレース（一種のくり込み！）をとった g の平均 $\langle g \rangle_{\mathscr{H}_g}$ を定義する：

$$\langle g \rangle_{\mathscr{H}_g} \equiv \frac{\mathrm{Tr}_g\, g\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_g}}{\mathrm{Tr}_g\, \mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_g}}. \tag{11.23}$$

この平均 $\langle g \rangle_{\mathscr{H}_g}$ は g 変数以外の確率変数を含むので f との相関 $\langle f \langle g \rangle_{\mathscr{H}_g} \rangle$ を考えることができる．これは相関 $\langle fg \rangle$ と等しい：

$$\langle fg \rangle = \langle f \langle g \rangle_{\mathscr{H}_g} \rangle. \tag{11.24}$$

この相関等式は次のようにして容易に証明できる[29]：

$$\mathrm{Tr}\, fg\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}} = \mathrm{Tr} \left[f\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}'} \left(g\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_g} \right) \right] = \mathrm{Tr}' \left[f\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}'} \left(\mathrm{Tr}_g g\mathrm{e}^{-\beta \mathscr{H}_g} \right) \right]$$

$$
\begin{aligned}
&= \mathrm{Tr}'\left[f\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}'}\left(\mathrm{Tr}_g\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}_g}\right)\left(\frac{\mathrm{Tr}_g\, g\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}_g}}{\mathrm{Tr}_g\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}_g}}\right)\right] \\
&= \mathrm{Tr}'\,\mathrm{Tr}_g\left(f\langle g\rangle_{\mathscr{H}_g}\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}'-\beta\mathscr{H}_g}\right) \\
&= \left\langle f\langle g\rangle_{\mathscr{H}_g}\right\rangle \mathrm{Tr}\,\mathrm{e}^{-\beta\mathscr{H}}. \qquad (11.25)
\end{aligned}
$$

ゆえに，等式 (11.24) が導かれる．要するに，これは，スピン自由度のトレースを 2 つの部分消去に分けて使い易い形にまとめ直した恒等式である．

特に $f=1$ とおいて

$$\langle g\rangle = \langle\langle g\rangle_{\mathscr{H}_g}\rangle \qquad (11.26)$$

となる．さらに，イジング模型 (11.21) に適用すると，相関等式 (11.22) が得られる．

また，$f=S_i, g=S_j\ (i\neq j)$ とおくと，

$$\langle S_iS_j\rangle = \left\langle S_i\tanh\left[\beta\left(\sum_k J_{jk}S_k+\beta\mu_{\mathrm{B}}H\right)\right]\right\rangle \qquad (11.27)$$

という相関等式が得られる[27~29]．

これらの相関等式は，一見自明な恒等式のようであるが，平衡系だけでなく[29]，臨界緩和現象のような非平衡系の問題にまで有効に利用されている[16,19]．特に，平衡系の臨界現象に関しては，磁場 H が零に対する式 (11.27) を平均場近似して得られる相関関数 $C(R)\equiv\langle S_iS_{i+R}\rangle$ の漸化式

$$C(R) = \beta J \sum_{\delta:\,R\,\text{の最近接格子点}} C(R+\delta) \qquad (11.28)$$

より，大きな R に対してラプラス方程式を導き，それを解いて，**オルンシュタイン・ゼルニケ型の相関関数**

$$C(R)\sim\frac{1}{R}\mathrm{e}^{-\kappa R};\ \kappa\propto(T-T_{\mathrm{c}})^{\frac{1}{2}},\ T_{\mathrm{c}}=\frac{zJ}{k_{\mathrm{B}}} \qquad (11.29)$$

が得られる[27~29]．ただし，相互作用 J_{ij} は z 個の最近接格子点間にのみ強さ J で働くものとし，相転移点近傍では式 (11.27) の右辺の値は小さいとしてその変形に $\tanh x\approx x$ の近似を行った．

上の相関等式の導出法には，（今思うと後の祭りであるが，）いくつかの興味深い考え方・手法が含まれている．自由度の部分消去を行うときに，ハミルトニアンではなく密度行列そのものの部分消去 $\mathrm{Tr}_g\exp(-\beta\mathscr{H}_g)$ を行っていることである．部分的な自由度 g の取り方をうまく行って $\mathscr{H}'\equiv0$ となるようにすると，これはまさしく「**密度行列くり込み**」になっている．これをくり返すと密度行列くり込み群（DMRG）になる[30]．実際，1 次元イジング模型で，1 つおきのスピン $\{S_{2j-1}\}$ 全体の自由度を g とすると，$\mathscr{H}_g=\mathscr{H}$, $\mathscr{H}'=0$ となり，一回自由度 g の消去を行うと，再び同形の密度行列が現れる．この方法に

よっても 1 次元イジング模型の厳密解が求められる[31]．

また，相関等式 (11.27) と，S_i を含まない $\langle S_j \rangle$ に関する相関等式の両方を連立させると，1 次元イジング模型では，厳密に磁化 $\langle S_j \rangle$ を求めることができて，厳密解 (11.18) から得られる状態方程式と一致する．

もとのハミルトニアンに対する全系の分布関数 ρ とその系の相関等式の全体（$N \to \infty$ で無限集合）とは等価であることにふれた（式 (11.20) 参照）が，実はこれをあらわに示す表示法がある[32~34]．一般に，時間 t における n 個の部分自由度（スピン）$S_{i_1}, S_{i_2}, \cdots, S_{i_n}$ に対する既約分布関数（他の自由度に関してはすでにトレースを取ったもの）$\rho_n(\{S_{i_k}\}, t)$ に対しては，

$$\rho_n(\{S_{i_k}\}, t) = \left(\frac{1}{2}\right)^n (1 + \langle S_{i_1} \rangle_t S_{i_1} + \cdots + \langle S_{i_n} \rangle_t S_{i_n}$$

$$+ \langle S_{i_1} S_{i_2} \rangle_t S_{i_1} S_{i_2} + \cdots + \langle S_{i_1} \cdots S_{i_n} \rangle_t S_{i_1} \cdots S_{i_n}) \qquad (11.30)$$

が成り立つ[32,34]．要するに，スピンの積の集合はトレースに関して，正規直交基底をなしており，それらの係数が時間 t におけるスピン相関関数となっている．もちろん，時間 t によらない平衡分布の場合には，平衡系の相関関数で表される．したがって，相関関数 (11.24) を用いる議論と分布関数を用いる議論とは等価である．つまり，**DMRG** は「**相関関数くり込み群**」であるとも言える．

本節では，仮想的（ゴースト）スピンを余分に導入して，系の対称性を回復させ，その後で対称性の破れの効果や磁場の効果を扱う方法を説明した．磁場が存在する場合にも成り立つ相関等式について一般的に議論し，実空間くり込みや DMRG との関連にも相関関数の視点でふれた．量子解析を用いると，量子スピン系でも保存量（全スピンなど）などに関する相関等式が示される[29]．

次章では，トポロジー変化法について解説する．

補遺：臨界緩和現象に関する動的くり込み群の理論

緩和時間を τ とするとき，相転移点 T_c の近傍で臨界指数 Δ を $\tau \sim (T - T_\mathrm{c})^{-\Delta}$ によって定義すると[19]，動的くり込み群の理論によれば，

$$\Delta = \nu\left(2 + c\eta + \mathrm{O}\left(\varepsilon^3\right)\right); \ c = 6\log\frac{4}{3} - 1 \simeq 0.7262 \qquad (11\mathrm{A}.6)$$

である[20]．ただし，ν と η は，相関関数 $C(R)$ の漸近形

$$C(R) \sim \frac{1}{R^{d-2+\eta}} \mathrm{e}^{-\kappa R}; \ \kappa \sim (T - T_\mathrm{c})^\nu \qquad (11\mathrm{A}.7)$$

によって定義される臨界指数である．また，ε は，系の次元数 d を用いて，$\varepsilon = 4 - d$ と定義される．式 (11A.6) より，明らかに，4 次元以下では Δ は磁化率の臨界指数 γ とは異なる．ちなみに，$\gamma = (2 - \eta)\nu$ を用いると，

$$\Delta - \gamma = 6\nu\eta\log\frac{4}{3} + \mathrm{O}(\varepsilon^3) > 0 \qquad (11\mathrm{A}.8)$$

である．

参考文献

1) アイザック・ニュートン著，中野猿人訳・注，『プリンシピア　自然哲学の数学的原理』（講談社，1977）．
2) 鈴木増雄，『活力を与える「物理」』（オーム社，2007）．
3) T.D. Lee and C.N. Yang, *Phys. Rev.* **87**, 410 (1952).
4) 鈴木増雄，『統計力学』（岩波書店，2000），岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）．
5) 鈴木増雄，『変分原理と物理学』（丸善出版，2015 年初版，および 2016 年重版）．
6) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **57**, 2310 (1988).
7) M. Suzuki and M.E. Fisher, *J. Math. Phys.* **12**, 235 (1971).
8) R.B. Griffiths, *J. Math. Phys.* **8**, 478, 484 (1967).
9) T. Asano, *Prog.Theor.Phys.* **40**, 1328 (1968); *J. Phys. Soc. Jpn.* **25**, 1220 (1968).
10) M. Suzuki, *J. Math. Phys.* **9**, 2064 (1968); *Prog. Theor. Phys.* **40**, 1246 (1968).
11) R.B. Griffiths, *J. Math. Phys.* **10**, 1559 (1969).
12) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **18**, 233 (1965). 磁場のあるイジング模型を，余分の“ゴースト”スピン（相互作用）を導入して磁場のない模型に変換する理論であり，これは筆者の単独で書いた最初の論文である．
13) T. Asano, *J. Phys. Soc. Jpn.* **29**, 150 (1970); *Phys. Rev. Lett.* **24**, 1409 (1970).
14) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **41**, 1438 (1969).
15) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **113**, 1391 (2005); M. Suzuki, H. Suzuki and S.-C. Chang, *J. Math. Phys.* **46**, 33301 (2005).
16) バテレ会議のプロシーディングス：*Critical Phenomena in Alloys, Magnets and Superconductors*, edited by R.E. Mills, E. Ascher and R.I. Jaffee (McGraw-Hill, 1970).
17) C. Di Castro and G. Jona-Lasinio, *Phys. Lett. A*29, 322 (1969).
18) K.G. Wilson, *Phys. Rev. B*4, 3174, 3184 (1971); *Phys. Rev. Lett.* **28**, 548 (1972).
19) M. Suzuki, H. Yahata and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **26** Suppl., 153 (1969); H. Yahata and M. Suzuki, ibid., **27**, 1421 (1969).
20) B.I. Halperin, P.C. Hohenberg and S. Ma, *Phys. Rev. B***10**. 139 (1974).
21) R. Abe, *Prog. Theor. Phys.* **38**, 72, 568 (1967).
22) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **38**, 289, 1225 (1967).
23) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 1151 (1977). この論文では，スピングラスの非線形磁化率が転移点で負に発散することが，ランダウの 2 次相転移の現象論を 2 つの秩序パラメータ（磁化とスピングラス秩序）の場合に拡張することにより導かれた．さらに，「実レプリカ法」を導入して，このスピングラス秩序を計算機で求める提案がされた．この方法はまさに，本文で説明したゴーストスピンの概念の応用になっている．すなわち，ゴーストスピン（レプリカスピン）ともとの（実）スピンとの相関によってスピングラス秩序が表される．
24) M. Suzuki, in *Evolutionary Trends in the Physical Sciences*, edited by M. Suzuki and R. Kubo (Springer-Verlag, Springer Proc. in Phys. 57, 1991).
25) T. Oguchi and Y. Ueno, *J. Phys. Soc. Jpn.* **41**, 1123 (1976).
26) H.B. Callen, *Phys. Lett.* **4**, 161 (1963).
27) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).
28) 鈴木増雄，「手順の分離と統合——指数積分解，秩序生成，およびエントロピー生成」，『数理物理　私の研究』（荒木不二洋／江口徹／大矢雅則編，丸善出版，2012）．
29) M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B***16**, 1749 (2002).
30) S.R. White, *Phys. Rev. Lett.* **43**, 883 (1992).
31) 江沢洋，渡辺敬二，鈴木増雄，田崎晴明，『くり込み群の方法』（岩波書店，2012），岩波オンデマンドブックス（2016 年 5 月）．
32) R.J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
33) M. Suzuki and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **24**, 51 (1968).
34) H. Falk and M. Suzuki, *Phys. Rev. B*1, 3051 (1970).

第 12 章
トポロジー変化法と臨界現象の物理トモグラフィー

前章で，物理系の変換・対応・等価性の効用について説明した．本章では，その発展とも言える「トポロジー変化法とその応用」および「臨界現象のトモグラフィー」について解説する．同じ 1 次元系でも，直線と円とは数学的には対称性とトポロジーが異なる．物理的には，2 つの系での力学的運動に本質的な違いがある．デカルト以前は，「もっとも自然な運動は円運動である」とされていた[1)]．これは閉じた空間を前提にした，天体観測などに基づく古来のナイーヴな自然観である．それに反して，デカルトは，等速直線運動が力の働かない場合のもっとも基本的な運動であると考えた[1)]．これは無際限空間を前提にしている．この考えは，「慣性の法則」としてニュートンの『プリンシピア』に取り入れられている[2)]．言うまでもなく，力学の原理や法則を別にすれば，極めて対称性の良い円は，その幾何学的形状だけでなく，その閉じた曲線上の自然現象（周期現象など）も合わせて大変魅力的である．高次元でこれに対応するのは球面である．トーラスも，トポロジーは異なるが，周期性に関しては類似の特徴を持っている．

ここでは，直線と円（またはループ），平面とトーラスのようにトポロジーの異なる系の臨界現象をトポロジーの変化という視点で取り扱う．この処法が「**トポロジー変化法**」である．さらに，これを発展させた「**臨界現象のトモグラフィー**」を議論する．

12.1 トポロジー変化法

相転移・臨界現象は無限に大きい系で起こる現象であり，通常の理論的研究では，端の効果は無視される[3)]．臨界現象の本質は，局所的に生じる「秩序」すなわち「ゆらぎ」という情報の伝わり方にある[3)]．後で，「**臨界現象のトモグラフィー**」として議論するように，端の存在する系や非一様な系などでは，どこにどのような刺激（外場）が加わるか，また，ゆらぎが発生するかによって

相転移・臨界現象の様子が変わってくる．これを研究するのは，一様な系の場合に比べて一層難しくなる．その一つの強力な方法が以下に説明する「**トポロジー変化法**」である．

簡単のために，次のハミルトニアンで記述される 2 次元イジング模型を考える：

$$\mathscr{H}_0 = -J_1 \sum_{j=1}^{M} \sum_{k=1}^{N} S_{j,k} S_{j,k+1} - J_2 \sum_{j=1}^{M-1} \sum_{k=1}^{N} S_{j,k} S_{j+1,k};\ S_{j,k} = \pm 1. \quad (12.1)$$

図 12.1 のように，長さが M，幅 N の 2 次元格子上にイジングスピン $\{S_{j,k}\}$ が置かれ，相互作用 $\mathscr{H}_0$ で互いに結合しているとする．この系に，次のトポロジカル相互作用[4,5]

$$\mathscr{H}_{\rm top} = -J_{\rm top} \sum_{k=1}^{N} S_{1,k} S_{M,k} \quad (12.2)$$

をつけ加えたハミルトニアン $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_{\rm top}$ を考える．この全系の状態和 $Z(J_{\rm top})$ を求めれば，系の両端間のスピン相関 $\langle S_{1,k} S_{M,k} \rangle \equiv C_M(J_{\rm top})$ が次の母関数の方法で得られることになる：

$$C_M(J_{\rm top}) = \frac{\partial}{\partial(\beta J_{\rm top})} \log Z(J_{\rm top});\ \beta = \frac{1}{k_{\rm B}T}. \quad (12.3)$$

ただし，T は系の温度である．

図 12.1 からわかる通り，相互作用 $J_{\rm top}$ が零の場合と零でない場合とでは，系のトポロジーが異なる．そこで，これを今後「**トポロジー変数**」と呼ぶことにする．実際，このトポロジーの違いを反映して，熱力学的極限（$N \to \infty$, $M \to \infty$）における相関関数 $C_\infty(J_{\rm top})$ はトポロジー変数 $J_{\rm top}$ に関して極めて特徴的な振

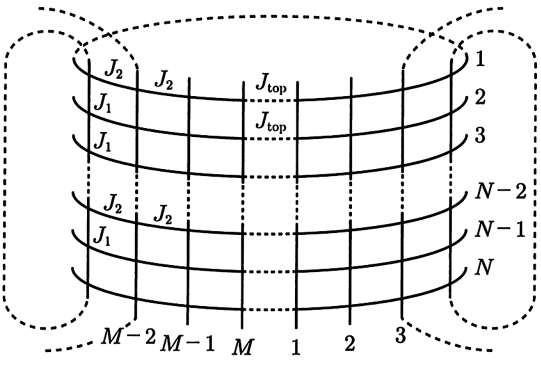


図 12.1 両端 1 と M とにあるスピン間を結ぶ相互作用 $J_{\rm top}$ は系のトポロジーを変える[4]．すなわち，$J_{\rm top} \neq 0$ の場合と $J_{\rm top} = 0$ の場合では系のトポロジーが異なり，前者の場合には，スピン相関 $\langle S_1 S_M \rangle$ は系のエネルギーと関連した物理量であるが，後者の場合は境界にあるスピンの秩序パラメーターに対応する（極限 $M \to \infty$ で，相関 $\langle S_1 S_M \rangle$ は自発境界磁化 $m_{\rm b}$ の平方になる）．

舞いを示す．すなわち，後で導くとおり，次の 2 つの命題が成り立つ．

(a) $J_{\text{top}} \neq 0$ のときは，$C_\infty(J_{\text{top}})$ は他の格子点における最近接相関関数 $\langle S_{j,k}S_{j+1,k}\rangle$ と同様な温度依存性，すなわち相転移点 T_c の近傍で**対数的異常性**（その微分が比熱の対数的発散）を示す：

$$C_\infty(J_{\text{top}}) \sim -(T-T_c)\log|T-T_c|;\ J_{\text{top}} \neq 0, \tag{12.4}$$

(b) $J_{\text{top}} = 0$ ($J_{\text{top}} \to +0$) のときは，

$$C_\infty(0) = \begin{cases} 0 & (T > T_c), \\ m_b^2 & (T < T_c). \end{cases} \tag{12.5}$$

ここで，m_b は**自発境界磁化**である．

極限公式 (12.5) を用いると，後で詳しく説明するように，自発境界磁化 m_b を求めることができる．この意味で，上の処法を「**トポロジー変化法**」と呼ぶことにする．**この方法では「近接相関」から「自発磁化」への質的変化をトポロジー変数 J_{top} の変化（すなわち，極限操作 $J_{\text{top}} \to +0$）で表現している．** 質的変化をパラメーターで表す伝統的な方法としては，系の対称性を被る磁場 H を導入して，それに共役な磁化を求め，熱力学的極限（系のサイズを無限大にする極限）の後で外場を零にする（$H \to +0$）ことによって自発磁化を求める処法もある．実際，この方法は 2 次元イジング模型の端の自発磁化を求める問題に応用されている[6~8]．これら 2 つの方法はパラメーターの極限操作を行う点では類似しているが，前者の「トポロジー変化法」は系の対称性を変えずにトポロジーの変化を利用することにより境界の自発磁化を求めることができる点で概念的に大変興味深い．この状況を次の節で詳しく調べてみよう．

12.2 エネルギーから自発境界磁化への転化

幸いに，2 次元イジング模型 $\mathscr{H} = \mathscr{H}_0 + \mathscr{H}_{\text{top}}$ の状態和 $Z(J_{\text{top}})$ は，ティープリッツ行列式の方法で厳密に求めることができる[5]．その計算は長くなるので，概要を補遺に記すのみにして，ここでは物理的な議論に必要な最終の表式とその直観的な説明をしたい．近接相関関数 $C_\infty(J_{\text{top}})$ は，補遺の式 (12A.4) より，式 (12A.6) の $\mathcal{S}(\theta)$ を用いて

$$C_\infty(J_{\text{top}}) = z_2\zeta + \frac{1-z_2^2\zeta^2}{2\pi z_2}\int_{-\pi}^{\pi}\frac{\zeta\,(1-\mathcal{S}(\theta))}{(\zeta^2+1)+(1-\zeta^2)\mathcal{S}(\theta)}d\theta \tag{12.6}$$

と表される．ただし，$\zeta = \tanh(\beta J_{\text{top}})/z_2$ である．

さて，上の積分に特異的に寄与する $\theta = 0$ 近傍の $\mathcal{S}(\theta)$ は，式 (12A.6) より，次のようにスケルトナイズされる：

$$\mathcal{S}(\theta) = \frac{a + b\theta^2 + \mathrm{O}(\theta^4)}{\sqrt{a^2 + c\theta^2 + \mathrm{O}(\theta^4)}} \tag{12.7}$$

ただし，

$$\begin{aligned} &a = (1 + z_1^2)(1 - z_2^2) - 2b = (1 - z_1)^2 - z_2^2(1 + z_1^2), \\ &b = z_1(1 + z_2^2), \\ &c = 2z_1(1 - z_2^2)\left[(1 + z_1^2)(1 + z_2^2) - 2z_1(1 - z_2^2)\right] = 2ab + 16z_1^2 z_2^2 \end{aligned} \tag{12.8}$$

である．さらに，a の符号 ($a \gtreqless 0$; $T \gtreqless T_\mathrm{c}$) に注意して $\mathcal{S}(\theta)$ を θ^2 で展開すると，

$$\mathcal{S}(\theta) = \begin{cases} 1 - 2\lambda^2\theta^2 + \mathrm{O}(\theta^4) & (T > T_\mathrm{c}), \\ -1 + 2\lambda^2\theta^2 + \mathrm{O}(\theta^4) & (T < T_\mathrm{c}) \end{cases} \tag{12.9}$$

となる．ただし，

$$\lambda = \frac{2z_1 z_2}{z_2(1 + z_1) - (1 - z_1)} \begin{cases} < 0 & (T > T_\mathrm{c}), \\ = \pm\infty & (T = T_\mathrm{c}), \\ > 0 & (T < T_\mathrm{c}) \end{cases} \tag{12.10}$$

である．すなわち，T_c の近傍で $\frac{1}{\lambda} \propto (T_\mathrm{c} - T)$ である．

関数 $\mathcal{S}(\theta)$ は，式 (12.6) からわかる通り，物理量 $C_\infty(J_\mathrm{top})$ の挙動を調べるための重要な関数である．これは，小さな θ に対して相転移点 T_c 近傍で，**絶妙な特異性**を示す．それによって，境界でのエネルギーを表す最近接相関関数 $C_\infty(J_\mathrm{top})$ が**トポロジー変数** J_top の零の極限で自発境界磁化へと転化するメカニズムが理解される．

まず，命題 (a)（$J_\mathrm{top} \neq 0$ の場合）から説明する．相転移点近傍（$a \simeq 0$）では，式 (12.6) の被積分関数の分母の $\mathcal{S}(\theta)$ は，式 (12.7) より $\mathcal{S}(\theta) \sim \theta$ であるから，$(\zeta^2 + 1)$ と比べて無視できる．一方，分子の $\mathcal{S}(\theta)$ は式 (12.7) の分子の $b\theta^2$ の項を無視して θ で積分すると**対数的異常性**を与える．

こうして，

$$C_\infty(J_\mathrm{top}) \sim -\frac{\zeta}{\zeta^2 + 1}\left((T - T_\mathrm{c})\log|T - T_\mathrm{c}|\right) + (\text{解析的項}) \tag{12.11}$$

となり，式 (12.4) すなわち，命題 (a) が導かれる．トポロジー変数 J_top 当りのエネルギーは $-J_\mathrm{top}C_\infty(J_\mathrm{top})$ で与えられるから，その温度微分で与えられる比熱は，バルクの場合と同じく，対数的異常性を示す．ただし，J_top が小さくなると，$\zeta \sim J_\mathrm{top}$ であるから，この局所的な比熱の異常性は，J_top^2 に比例して小さくなる．

次に，命題 (b) の議論に入る．すなわち，相転移点以下（$T < T_\mathrm{c}$）において，トポロジー変数 J_top の零の極限 $\zeta \to +0$ をとり，自発境界磁化 m_b を公式

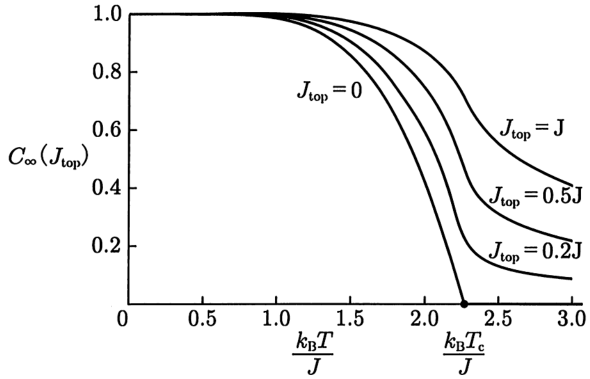


図 12.2　近接相関関数 $C_\infty(J_{\rm top})$ の温度変化のトポロジー変数 $J_{\rm top}$ 依存性（$J_1 = J_2 = J$ の場合）[5]．これらはすべて，相転移点 $k_{\rm B}T_{\rm c}/J = 2.269\cdots$ で $-|T-T_{\rm c}|\log|T-T_{\rm c}|$ の異常性を示す．それらがトポロジー変数 $J_{\rm top}\to 0$ の極限で自発境界磁化 $m_{\rm b}$ の平方 $m_{\rm b}^2$ に転化する様子がわかる．すなわち，対数的特異性が質的に異なる他の特異性に変わる．

(12.5) を用いて，式 (12.6) より求める．関数 $\mathcal{S}(\theta)$ の展開式 (12.9) を式 (12.6) に代入して，極限 $\zeta\to+0$ をとると，

$$C_\infty(0) = \frac{1}{2\pi z_2}\int_{-\pi}^{\pi}\lim_{\zeta\to+0}\frac{\zeta}{\zeta^2+\lambda^2\theta^2}d\theta = \frac{1}{2z_2}\int_{-\pi}^{\pi}\delta(\lambda\theta)d\theta = \frac{1}{2z_2\lambda} \tag{12.12}$$

となる．よって，自発境界磁化 $m_{\rm b}$ は次のように求まる：

$$m_{\rm b} = (C_\infty(0))^{\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\sqrt{z_1}z_2}\left[z_2^2(1+z_1)^2-(1-z_1)^2\right]^{\frac{1}{2}} \propto (T_{\rm c}-T)^{\frac{1}{2}}. \tag{12.13}$$

もちろん，相転移点以上（$T > T_{\rm c}$）では，展開式 $\mathcal{S}(\theta) = 1-2\lambda^2\theta^2+{\rm O}(\theta^4)$ を用いると，$C_\infty(0)=0$ であることが容易にわかる．

自発境界磁化の臨界指数 $\beta_{\rm b}$ がバルクの β の値 $\beta=\frac{1}{8}$ とは全く異なり，$\beta_{\rm b}=\frac{1}{2}$ となり平均場理論の場合と同じになることは注目すべきことである．この物理的意味については後の節で詳しく議論するが，一口で言えば，境界のスピンは片面側だけから磁気秩序の情報を受けとるので，一方的に平均化されて臨界指数 $\beta_{\rm b}=\frac{1}{2}$ となるものと考えられる．

以上で，命題 (a) と (b) を解析的に調べたが，これら 2 つの関係を可視化すると，図 12.2 のようになる[5]．トポロジー変数 $J_{\rm top}$ を小さくするにつれて，相転移点 $T_{\rm c}$ で対数的異常性を持つ近接相関関数 $C_\infty(J_{\rm top})$ が徐々に自発境界磁化 $m_{\rm b}\sim(T_{\rm c}-T)^{\frac{1}{2}}$ の平方 $m_{\rm b}^2$ に近づく様子がわかる．このように，異常性の全く異なる物理量が一方から他方へと転化していくことは大変興味深い．

12.3 ゴーストスピン法による境界磁化の相転移・臨界現象の研究

大変興味深いことに，マッコイ（McCoy）とウー（Wu）[6,7]は，左端の 1 列のスピンにのみ磁場 H のかかった 2 次元イジング模型の状態和を図 12.3 のようにゴーストスピン法[10]とティープリッツ行列法を用いて厳密に求めることに 1967 年に初めて成功した．この研究は，非自明なスピン系において（部分的にではあるが）磁場のある問題を初めて厳密に解いた画期的なものである．これは膨大な数理的計算を含むので，ここでその詳細に立ち入ることはできないが，その計算結果を我々の新しい視点から議論し，その物理的妥当性を検討する．彼らの得た主な結果を列挙すると次の通りになる：

(i) 境界の自発磁化 $m_{\rm b}$ は式 (12.13) で与えられる．すなわち，$m_{\rm b} \sim (T_{\rm c} - T)^{\beta_{\rm b}}$; $\beta_{\rm b} = \frac{1}{2}$ である．前節のトポロジー変化法による我々の研究は，これを確認したことになる．

(ii) 「境界スピンの磁化率」$\chi_{\rm b}$ は相転移点近傍で対数的異常性を示す：$\chi_{\rm b} \sim -\log|T - T_{\rm c}|$.

(iii) 境界の比熱 $C_{\rm b}$ は $|T - T_{\rm c}|^{-1}$ の発散を示す．すなわち，これを積分したエントロピー（またはエネルギー）は相転移点 $T_{\rm c}$ で対数的に発散する．

さて，これらの数理的な結果をどう解釈すべきか．その答えは，彼らの論文には与えられていない．(i) の $m_{\rm b}$ の式は，我々の研究[5]でも確かめられており納得できる．すなわち，ゆらぎが押えられて，平均場近似的な振舞いを示すことになったものと考えられる．しかし，(ii) の $\chi_{\rm b}$ に関する結果（すなわち，対数的異常性）は，観測の仕方にもよるが，一般には理解し難い．まして，(iii) の比熱が $T_{\rm c}$ で $|T - T_{\rm c}|^{-1}$ で発散するのは不自然である．これらは長い間懸案の問題であったが，最近解決された[11]．その答えのヒントは **“数理と物理のト**

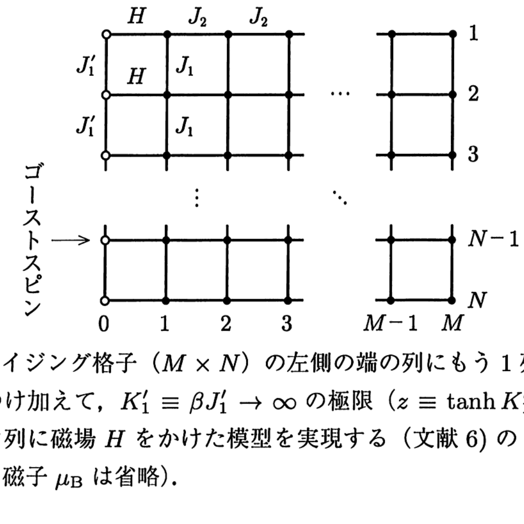


図 12.3　2 次元イジング格子（$M \times N$）の左側の端の列にもう 1 列ゴーストスピン列をつけ加えて，$K_1' \equiv \beta J_1' \to \infty$ の極限（$z \equiv \tanh K_1' \to 1$）で左端のスピン列に磁場 H をかけた模型を実現する（文献 6) の Fig.3(a) に対応．ボーア磁子 $\mu_{\rm B}$ は省略）．

レードオフ" である．これは次の節で説明したい．

12.4 臨界現象の物理トモグラフィー

相転移・臨界現象の物理を理解する際に系の幾何学的な次元 d が重要な役割を果たす[3,12]．通常は観測量も系の大きさ（粒子やスピンの総数）に比例する示量的な物理量（系全体のエネルギーや磁化など）を扱うことが多い．しかし，前節の例のように，数学的な厳密性を重んじる研究では，その解法の困難さゆえに，対象とする物理量を系全体ではなく幾何学的に特徴のある部分系に止むを得ず限定して扱うことが多い．その場合に**問題となるのは，対称性を破る外場をどのような幾何学的な領域にかけるのが物理的であるかということである．**こういうたぐいの "**系の幾何学的構造，物理現象およびその観測とが絡み合った問題**" を**物理トモグラフィー**と呼ぶことにしよう．ここでは，臨界現象の物理トモグラフィーを議論する．

(i) ヤン・ゼルニケ問題[12]—有限領域にかけた有限の外場は混合状態を作る

スピン系の相転移点 T_c 以下では，図 12.4 のように「+」方向に自発磁化 m_s を持つ状態 Ψ_+ と「−」方向に自発磁化 $-m_s$ を持つ状態 Ψ_- が存在する．図 12.5 のように，有限領域 Ω に有限（零ではない値）か無限大の磁場をかけると系はどのような状態になるかという問題を Ω が 1 つの格子点の場合にゼルニケが提起し，ヤンが解いた[13]．特に，1 点にかける磁場 H を $H=\infty$ にして，そこのスピン S_0 を $S_0=1$ に固定すると，系の状態は図 12.4 の B の混合状態 $\Psi=c\Psi_+ +(1-c)\Psi_-$

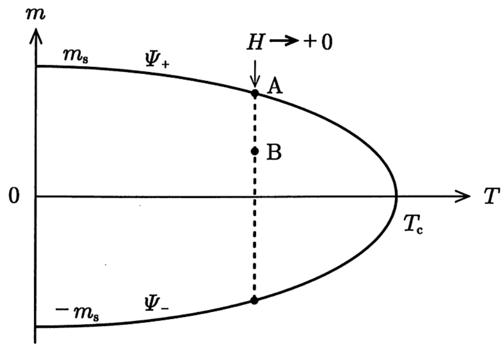


図 12.4 相転移点以下では 2 つのプロセス A と B が存在する[11]．磁場 $H \to +0$ の極限操作で系は A の状態（自発磁化 m_s）に近づく．一方，有限領域 Ω のスピンをすべて 1 に固定することにより，B の混合状態 $\Psi=c\Psi_+ +(1-c)\Psi_-$ を作ることができる．ただし，c は m_s^2 に比例する．

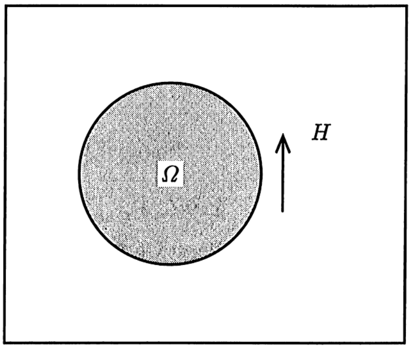


図 12.5 有限領域 Ω に磁場 H をかけて混合状態を作る[11]．

となる．ただし，混合係数 c は $c=\frac{1}{2}(1+m_{\rm s})$ で与えられる[11,12]．したがって，この混合状態における系全体の磁化 M は $M=$ (スピン総数) $\times\, m_{\rm s}^2$ となる[11,12]．この問題は有限の外場をかける領域を 1 点から図 12.5 のように任意の有限領域 Ω に拡張しても，上のヤン・ゼルニケの命題は定性的には成立する．すなわち，全磁化 M は $m_{\rm s}^2$ に比例する[12]．しかも，**有限の Ω に対して $H\to\pm0$ にすると $c=\frac{1}{2}$ となり $M=0$ となる．**

(ii) 自発磁化を創り出すための磁場領域の最小次元の存在

前項 (i) で議論した通り，有限領域 Ω に磁場をかけて，熱力学的極限，すなわち系のサイズを ∞ にしてから，極限 $H\to+0$（または $H\to-0$）にしても自発磁化は求まらず，**自発的対称性**は破れない．したがって，自発磁化を創り出すための磁場領域の最小次元 $d_{\rm min}^{(自発)}$ が存在するはずである．それは $d_{\rm min}^{(自発)}=\frac{\beta}{\nu}$ で与えられる[12]．例えば，2 次元イジング模型では，$\beta=\frac{1}{8}$, $\nu=1$ であるから，$d_{\rm min}^{(自発)}=\frac{1}{8}$ となり，1 次元領域に磁場 H をかけて熱力学的極限をとった後で，$H\to+0$ とすることにより，自発磁化を持つ対称性の破れた状態が求められる．こうして，前節，前々節での $m_{\rm s}$ の求め方が正当化される．

(iii) 物理的な磁化率を求めるための磁場領域の最小次元の存在

前節で議論したように，系の境界の 1 次元系に磁場 H をかけて，磁化 $m=m_{\rm b}(H)$ を求め，$H\to+0$ の極限で自発境界磁化 $m_{\rm b}$ が正しく求まっても，その H の 1 次の項が観測の対象となる物理的な磁化率 $\chi_{\rm b}$ を与えるとは限らない．実際，前節のマッコイ達の計算では，$\chi_{\rm b}$ は相転移点近傍で対数発散という極めて弱い異常性を示し不自然である．それは**正しい磁化率を与える程度の十分なスピンゆらぎが取り込まれていない**からである．すなわち，かける磁場の領域を 2 次元に広げる必要があったのである．このように，**磁化率という応答係数まで正しく求めるための磁場領域の最小次元 $d_{\rm min}^{(応答)}$ が存在する**．それは，次の不等式

$$d_{\rm min}^{(応答)}>d_{\rm min}^{(自発)} \tag{12.14}$$

をみたす．自発磁化は局所的に定義される物理量であるが，応答関数はよりグローバルな物理量である．

前節の磁化率の問題の解決には，厳密には，全系のスピンに磁場 H をかけ，境界のスピン $m_{\rm b}(H)$ を求め，H の 1 次の係数として境界磁化率 $\chi_{\rm b}(T)$ を求めなければならない．これは現在のところ厳密に解くのは無理な話である．そこで，ここでは直観的な議論で満足することにしよう．これが前節の終りに述べた

“数理と物理のトレードオフ”

という意味合いである．

文献 6) では，端のスピンどうしの相関 $C_{\rm b}(R)$ が互いの距離 R の関数と

$\frac{1}{R}\exp(-\kappa R)$ で記述されると解釈できるような計算結果が示されている．ただし，今の問題では $\kappa \propto |T - T_{\rm c}|$ である．このスピン相関関数の漸近形は少し格子の中のほうに入っても一方のスピンが境界にあれば成立すると考えられる．これを仮定すると，**新しい物理的な定義に基づく"境界磁化率"** $\chi_{\rm b}(T)$ は

$$\chi_{\rm b}(T) \sim \int_0^\infty \frac{{\rm e}^{-\kappa R}}{R} d^2R \sim \frac{1}{\kappa} \sim \frac{1}{(T-T_{\rm c})^{\gamma_{\rm b}}};\ \gamma_{\rm b} = 1 \qquad (12.15)$$

となる[11]．この発散は，$\beta_{\rm b} = \frac{1}{2}$ と対応して，平均場理論の振舞いと一致し，物理的に受け入れられる結果である．

(iv) 部分領域の比熱の物理的定義とそのグローバル性

前項の磁化率の定義で用いられる外力としての磁場 H は原理的には局所的にかけることもできるが，比熱はエネルギーの温度変化（微分）として定義されるので，外力に相当する物理的変数は熱浴の温度（の逆数 β）である．これを局所的に変化させるのは容易でない．

前節のマッコイ・ウーの比熱が相転移点 $T_{\rm c}$ 近傍で $(T-T_{\rm c})^{-1}$ で発散し，その積分であるエントロピーまたはエネルギーが対数発散するという物理的でないという課題は上の一般的な視点から次のように解決される．彼らの計算では，境界のある 2 次元スピン系全体の自由エネルギーをスピン総数に比例する部分と端のスピン数に比例する部分に分けて，後者の温度微分として境界の比熱を定義した．これは一見妥当な定義に見えるが，後者の自由エネルギーには，境界があるために少し格子の内側にあるスピンエネルギーも変化を受けた効果がすべて含まれている．この効果は相転移点に近くなるほど大きくなり，影響を受けるスピン対の数も 2 次元的に増える．その結果として，境界のスピン一個当りのエネルギーまたはエントロピーが，見かけ上，相転移点で無限大になる（もちろん，系のスピン総数で割れば有限である）．

そこで，次のような物理的な"境界比熱"を定義する．まず，境界エネルギー $E_{\rm b}(T)$ を境界上のスピン対のみを用いて定義する：

$$E_{\rm b}(T) = -J_1 \sum_{k=1}^{N} \langle S_{1,k} S_{1,k+1} \rangle. \qquad (12.16)$$

この温度微分として**境界比熱** $C_{\rm b}(T)$ を定義する：

$$C_{\rm b}(T) = \frac{dE_{\rm b}(T)}{dT}. \qquad (12.17)$$

これはごく自然な定義であるが，これを計算するには境界上のスピン対の期待値を全系の自由エネルギーとは別に求める必要に迫られる．この計算は数理的にはより面倒になる[14]．ここでは，境界磁化率の場合と同様に再び直観的な議論で満足することにしよう．前節における両境界端間のスピン相関関数が $J_{\rm top} \neq 0$ の場合には，式 (12.11) のような異常性を持つことと，そのスピン対とは方向の異なる境界上のスピン対相関は相関等式[15]で（線形に）結ばれているので，やは

り，式 (12.11) と同じ異常性を持つと考えられる[14]．これを認めると，$E_{\rm b}(T)$ も同様な異常性を持つことになり，境界比熱 $C_{\rm b}(T)$ は

$$C_{\rm b}(T) \sim -\log|T-T_{\rm c}| \sim |T-T_{\rm c}|^{-\alpha_{\rm b}};\ \alpha_{\rm b}=0 \tag{12.18}$$

と対数的発散を示す．比熱の臨界指数 $\alpha_{\rm b}$ は $\alpha_{\rm b}=0$ (対数) となる．こうして，3 つの臨界指数 $\alpha_{\rm b}, \beta_{\rm b}, \gamma_{\rm b}$ が $\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$ と求まり，スケーリング則 $\alpha_{\rm b}+2\beta_{\rm b}+\gamma_{\rm b}=2$ をみたす，バルクとは異なる普遍性の臨界現象が境界領域で起こることがわかる．

これらは，**臨界現象の物理トモグラフィー**として大変興味深い例になっている．

12.5 単一系，同一温度領域における 2 種類の普遍性クラスの臨界現象の出現

前節の 2 次元イジング模型の境界での臨界現象は，単に境界上のスピンに限定されるものではなく，その近傍（相関距離 $\zeta \sim \kappa^{-1}$ 程度までの帯状の領域）では，同じ普遍性クラス $(\alpha_{\rm b}, \beta_{\rm b}, \gamma_{\rm b}) = \left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$ の臨界現象が起こると考えられる．

このように，単一系，同一温度領域で，異なる普遍性クラスの臨界現象の出現は，3 次元イジング模型や他のスピン系でも可能であると考えられる．特に，4 次元以上のイジング模型では，バルクの普遍性クラスが平均場理論の値 $\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$ であるから，境界臨界指数の値も同じクラスになると予想される．この場合は，両方とも平均場理論と同じになってしまうが，3 次元の場合は，互いに異なるクラスになるので興味深い．その**境界臨界指数** $(\alpha_{\rm b}, \beta_{\rm b}, \gamma_{\rm b})$ は，2 次元系と 4 次元系の両方が平均場の値 $\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$ となるので，臨界指数の次元に関する単調性を仮定して，中間の 3 次元でも同じく $\left(0, \frac{1}{2}, 1\right)$ となると予想される．これを具体的に確かめてみることは興味深い問題の一つであろう．

本章では，境界のある 2 次元イジング模型の境界領域での自発磁化，磁化率および比熱の臨界指数を求め，バルクとは異なる普遍性クラスを持つ臨界現象の出現を，臨界現象の物理トモグラフィーという広い視点で詳しく議論した．トポロジー変化法やゴーストスピン法という，臨界現象の数理的現象に有効な方法論とこれらから得られる結果を物理的に捉えるために，物理トモグラフィーという概念を導入した．

補遺：トポロジー変化法の応用—2 次元イジング模型のトポロジー相関関数 $C_M(J_{\rm top})$

図 12.1 のように，上下方向には周期境界条件をつけ，左右両端 1 列と M 列との間のスピン相互作用の強さを $J_{\rm top}$ として，ティープリッツ行列式の方法で解くと，幅 N が無限大の極限（$N \to \infty$）では，式 (12.3) から得られる（問題の）相関関数 $C_M(J_{\rm top})$ は

$$C_M(J_{\rm top}) = z_2\zeta + \frac{1-z_2^2\zeta^2}{2\pi z_2}\int_0^{2\pi}\frac{(f'\alpha^M + f\alpha^{-M})\zeta + 1}{(f+f'\zeta^2)\alpha^M + (f'+f\zeta^2)\alpha^{-M} + 2\zeta}d\theta \tag{12A.1}$$

で与えられる[5)]．ただし，$z_1 = \tanh(\beta J_1)$, $z_2 = \tanh(\beta J_2)$, $\zeta = \tanh(\beta J_{\rm top})/z_2$, および $\alpha = \alpha(\theta)$ は次の 2 次方程式の大きいほうの根である：

$$z_2(1-z_1^2)\left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right) + 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta - (1+z_1^2)(1+z_2^2) = 0. \tag{12A.2}$$

また，関数 $f = f(\alpha)$ と $f' \equiv f\left(\frac{1}{\alpha}\right)$ は次式で与えられる[5)]：

$$\begin{aligned} f = f(\alpha) &= \frac{(\alpha - \frac{z_2}{z_1})(\alpha - x_1 z_2)}{(1-z_2^2)(\alpha^2-1)};\ x_1 = \frac{1-z_1}{1+z_1} = {\rm e}^{-\beta J_1}, \\ f' &\equiv f\left(\frac{1}{\alpha}\right) = 1 - f(\alpha). \end{aligned} \tag{12A.3}$$

式 (12A.1) の被積分関数は大変複雑に見えるが，$T \neq T_{\rm c}$ のとき $\alpha(\theta) \geq \alpha(0) > 1$ であることを用いると極限 $M \to \infty$ では少し簡単化され，無限系における近接相関関数 $C_\infty(J_{\rm top})$ は

$$C_\infty(J_{\rm top}) = z_2\zeta + \frac{1-z_2^2\zeta^2}{2\pi z_2}\int_0^{2\pi}\frac{\zeta f\left(\frac{1}{\alpha(\theta)}\right)}{f\left(\alpha(\theta)\right) + \zeta^2 f\left(\frac{1}{\alpha(\theta)}\right)}d\theta \tag{12A.4}$$

となる[5)]．相転移点 $T_{\rm c}$ は，$\alpha(0) \equiv (1-z_1)/\left\{(1+z_1)z_2\right\} = 1$ で与えられる．したがって，$f(\alpha)$ と $f\left(\frac{1}{\alpha}\right)$ は $\alpha = 1$（相転移点）に関して**相対関係**にある．特に，$T = T_{\rm c}$ では，$f(1) = \frac{1}{2}$ である．

さて，方程式 (12A.2) の大きいほうの根 $\alpha(\theta)$ を $f\left(\alpha(\theta)\right)$ と $f\left(\frac{1}{\alpha(\theta)}\right)$ に代入すると，それぞれ次のように表される：

$$f\left(\alpha(\theta)\right) = \frac{1}{2}\left(1 + \mathcal{S}(\theta)\right),\quad f\left(\frac{1}{\alpha(\theta)}\right) = \frac{1}{2}\left(1 - \mathcal{S}(\theta)\right). \tag{12A.5}$$

ただし，$\mathcal{S}(\theta)$ は次式で与えられる：

$$\mathcal{S}(\theta) = \frac{(1+z_1^2)(1-z_2^2) - 2z_1(1+z_2^2)\cos\theta}{\sqrt{\left\{(1+z_1^2)(1+z_2^2) - 2z_1(1-z_2^2)\cos\theta\right\}^2 - 4z_2^2(1-z_1^2)^2}}. \tag{12A.6}$$

ここで，$\mathcal{S}(\theta)$ の分母の根号を式のまま開平する際は，相転移点 $T_{\rm c}$ の前後で式の値として，符号の変化に注意して正しい分枝を採用しなければならない．

また，$J_{\rm top} = J_2$（一様な相互作用）とおくとオンサーガーの解[9)]と一致することも容易に確かめられる．

参考文献

1) 小林道夫,「デカルトにおける自然学（物理学）の形而上学的基礎づけについて」, 日本学士院紀要第 **71** 巻第 1 号頁 1〜15（2017 年）. この文献を教示頂いた小林比呂志氏に感謝致します.
2) アイザック・ニュートン著, 中野猿人訳・注,『プリンシピア　自然哲学の数学的原理』(講談社, 1977).
3) 鈴木増雄,『統計力学』（岩波書店, 2000）, 岩波オンデマンドブックス（2016 年 1 月）.
4) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **113**, 1391 (2005).
5) M. Suzuki, H. Suzuki and S.C. Chang, *J. Math. Phys.* Vol.**46**, 033301 (2005).
6) B.M. McCoy and T.T. Wu, *Phys. Rev.* **162**, 436 (1967).
7) B.M. McCoy and T.T. Wu, *The Two-Dimensional Ising Model* (Harvard University Press, Cambridge, 1973).
8) H. Au-Yang and M.E. Fisher, *Phys. Rev. B* **21**, 3956 (1980).
9) L. Onsager, *Phys. Rev.* **65**, 117 (1944).
10) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **18**, 233 (1965). 惜しいことに, この論文は 1973 年の 7) には引用されていない. この論文で初めて提案されたゴーストスピン法については, 前章で詳しく説明した. 7) はその最も重要な応用例になっていると言える.
11) M. Suzuki, *Proc. Japan Acad. Ser. B*, 準備中.
12) M. Suzuki and H. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **73**, 3299 (2004).
13) C.N. Yang, *Phys. Rev.* **85**, 808 (1952).
14) M. Suzuki *et al.*, 準備中.
15) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **19**, 267 (1965).

第 13 章
さらなる研究に向けて—まとめと展望

これまで，量子古典対応という概念を柱に，経路積分（和）と量子解析（非可換微積分法）を主な手段にして，量子現象，特に統計物理学のテーマを中心に解説してきた．ニュートンの力学に見られるように，どういう物理現象を理論的に扱うかは，それを取り扱う手段に大きく左右される．今まで解説した例からもわかる通り，数学的に厳密に問題を解こうとすると，扱う系が限定されてくる．実験可能な現実的な系を扱うには，近似的な取り扱いで満足するか，計算機シミュレーション等の数値計算に頼らなければならない．いずれにしても，これまで紹介してきた様々な方法論は，今後も大いに役立つものと期待される．また，本書ではふれていない興味深いテーマもまだ多数ある．その中のいくつかについて，今後の発展性も含めて議論したい．

13.1 動的古典系と量子系との対応・等価性

ストカスティックな古典ダイナミクスを扱う方法にはいろいろある[1~3]が，ここでは，グラウバー（R.J. Glauber）によって提唱された**動的イジング模型**[4]とその拡張[5~7]について量子系との対応・等価性[8,9]という視点で議論する．そのねらいは，厳密解が求まる動的古典系のカテゴリーを探すことにある．

ミクロなゆらぎを取り込んで非平衡現象を数理的に扱うのにもっとも基本的な模型は，イジング模型にダイナミクスを導入した次の系である．すなわち，格子点 $(1,2,\cdots,N)$ 上のイジングスピン変数 $(S_1,S_2,\cdots,S_N)$ の時刻 t における確率分布 $P(S_1,S_2,\cdots,S_N;t)$ が次の**マスター方程式**にしたがうものとする[1,2]：

$$\frac{d}{dt}P(S_1,\cdots,S_N;t)=-\sum_j W_j(S_j)P(S_1,\cdots,S_N;t)+\sum_j W_j(-S_j)P(S_1,\cdots,-S_j,\cdots,S_N;t)\equiv \Gamma P. \tag{13.1}$$

ただし，$W_j(S_j)$ は，スピン S_j が $-S_j$ に遷移する確率を表し，スピン S_j 以外のスピンも含む[1]．この**遷移確率** $W_j(S_j)$ は，通常，式 (13.1) の定常解が平衡系のイジング模型のカノニカル分布

$$P_{\rm eq}(\{S_j\}) = \frac{{\rm e}^{-\beta\mathscr{H}}}{Z(\beta)};\ Z(\beta) = {\rm Tr}\,{\rm e}^{-\beta\mathscr{H}} \tag{13.2}$$

となるように決める[1,4,5]．ここで，$\mathscr{H}$ は次のように与えられるイジングハミルトニアンである：

$$\mathscr{H} = -\sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j - \mu_{\rm B} H \sum_j S_j;\ S_j = \pm 1. \tag{13.3}$$

上の十分条件である**詳細つり合いの条件**

$$\frac{W(S_j)}{W(-S_j)} = \frac{\exp(-\beta E_j S_j)}{\exp(\beta E_j S_j)} = \frac{1 - S_j \tanh(\beta E_j)}{1 + S_j \tanh(\beta E_j)} \tag{13.4}$$

を用いて，$W(S_j)$ の形を求めることにする．ただし，

$$E_j = \sum_k J_{jk} S_k + \mu_{\rm B} H \tag{13.5}$$

である．式 (13.4) を満たす**一般的な遷移確率** $W_j(S_j)$ は

$$W_j(S_j) = \frac{\alpha}{2}(1 - S_j \tanh(\beta E_j)) \tag{13.6}$$

である[1,5]．ここで，α は 1 個の自由スピンの緩和時間の逆数を表す．特に，1 次元（最近接相互作用で $H = 0$）の場合は，$E_j = J(S_{j-1} + S_{j+1})$ となるので，$W_j(S_j)$ は次のように簡単になる：

$$W_j(S_j) = \frac{\alpha}{2}\left[1 - \frac{\gamma}{2} S_j (S_{j-1} + S_{j+1})\right];\ \gamma = \tanh(2\beta J). \tag{13.7}$$

これはよく知られたグラウバーの遷移確率である[4]．2 次元以上の場合に広く用いられている遷移確率 $W_j(S_j)$ の一般的な表式 (13.6) は，スピン変数の 3 次以上の高次の項を含む複雑な形をしている[5]．そのため，2 次元以上の動的イジング模型は今も厳密には解かれていない．その困難さの程度については 13.6 節で改めて議論する．

古典的なマスター方程式 (13.1) は，形式的に

$$\frac{dP(\{S_j\}, t)}{dt} = \mathit{\Gamma} P(\{S_j\}, t) \equiv \sum_j (\mathscr{P}_j - 1) W_j(S_j) P(\{S_j\}, t) \tag{13.8}$$

と表せる．ただし，$\mathscr{P}_j$ は S_j を $(-S_j)$ に変換する演算子である：$\mathscr{P} S_j = -S_j$．

この古典的な系のダイナミクスを数理的に扱うには，確率分布 $P(\{S_j\}, t)$ をスピン空間の状態ベクトルの振幅として定式化するのが便利である．すなわち，イジングスピン S_j を**パウリスピン演算子** σ_j^z の固有値として取り扱う：

$$\sigma_j^z \alpha_j = S_j \alpha_j;\ S_j = 1,\ \alpha_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j \quad \text{および}$$

$$\sigma_j^z \beta_j = S_j \beta_j;\ S_j = -1,\ \beta_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j . \tag{13.9}$$

さて，N 個のスピン系の 2^N 次元のヒルベルト空間 $\mathscr{H}_N$ の直積ベースを $|\{S_j\}\rangle$ と書く：例えば，$|+1,+1,\cdots,+1\rangle = \alpha_1\alpha_2\cdots\alpha_N$，$|-1,+1,-1,\cdots,+1\rangle = \beta_1\alpha_2\beta_3\cdots\alpha_N$ などである．2 つのベースの内積 $\langle\{S_j\} \mid \{S_j{}'\}\rangle$ は，

$$\langle\{S_j\} \mid \{S_j{}'\}\rangle = \prod_{j=1}^{N} \delta_{S_j, S_j{}'} \tag{13.10}$$

で定義される．ここで，$\delta_{x,y}$ はクロネッカーのデルタである (すなわち，$\delta_{x,y} = 1$; $x = y$ および $\delta_{x,y} = 0$; $x \neq y$)．この表示では，**確率分布** $P(\{S_j\}, t)$ は，ヒルベルト空間 $\mathscr{H}_N$ の時間に依存するベクトル

$$|P(t)\rangle = |P(\{S_j\}, t)\rangle = \sum_{\{S_j = \pm 1\}} P(\{S_j\}, t)\, |\{S_j\}\rangle \tag{13.11}$$

で表現される．この表示を用いると，古典的なマスター方程式 (13.8) は，次の量子系の**時間発展方程式**で記述される（変換される）：

$$\frac{d}{dt}|P(t)\rangle = \mathscr{L}\,|P(t)\rangle \equiv \sum_{j=1}^{N} \left(\sigma_j^x - 1\right) W_j \left(\sigma_j^z\right)\, |P(t)\rangle. \tag{13.12}$$

ただし，σ_j^x は j 番目のパウリスピンの x 成分であり，次の関係式を満たす：

$$\begin{aligned} \sigma_j^x \sigma_j^z \left(\alpha_j + \beta_j\right) &= \sigma_j^x \sigma_j^z \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_j \\ &= \sigma_j^x \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}_j = \left(-\sigma_j^z\right) \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_j . \end{aligned} \tag{13.13}$$

すなわち，よく知られているように，σ_j^x はスピン反転演算子である．式 (13.12) の時間発展演算子 $\mathscr{L}$ は，$\sigma_j^x \sigma_j^z = -i\sigma_j^y$ のような反エルミートな演算子と $W(\sigma_j^z)$ のようなエルミート演算子との和になっているので，このままでは数学的に扱いにくい．勿論，形式的には，式 (13.12) の解は $|P(t)\rangle = \mathrm{e}^{t\mathscr{L}}\,|P(0)\rangle$ と書ける．

物理の問題としては，状態ベクトル $|P(t)\rangle$ を求めるのではなく，外場に対する応答を求めることが重要になる．今，磁場 H に対する応答を考えると，それは $H = 0$ のときの平衡状態における，2 つの物理量 $A(t)$ と B の時間相関関数 $\langle A(t)B\rangle_{\mathrm{eq}}$ で表される．したがって，この物理量の定式化を考えることにする．磁場のない 1 次元イジング模型の（量子的な）ハミルトニアン

$$\mathscr{H} = -J \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z \tag{13.14}$$

で例示されるような，一般的なイジング系の平衡密度行列 $\rho_{\text{eq}} = \exp(-\beta\mathscr{H}) / \mathrm{Tr}\exp(-\beta\mathscr{H})$ を用いると，その平衡系の状態ベクトル $|P_{\text{eq}}\rangle$ は

$$|P_{\text{eq}}\rangle = \rho_{\text{eq}}|\mathbf{1}\rangle \equiv \rho_{\text{eq}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_1 \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_2 \times \cdots \times \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}_N \tag{13.15}$$

と表せる．これより，対角成分 $\{\sigma_j^z\}$ のみで表される2つの物理量 $A = A^z, B = B^z$ に対する時間相関関数 $\langle A(t)B\rangle_{\text{eq}}$ は

$$\langle A(t)B\rangle_{\text{eq}} = \langle\mathbf{1}| A^z \mathrm{e}^{t\mathscr{L}} B^z \rho_{\text{eq}} |\mathbf{1}\rangle \tag{13.16}$$

と書ける[6]．平衡系の密度行列 ρ_{eq} の定義より，ρ_{eq} は A^z や B^z と可換である．したがって，式 (13.16) は次のように対称性の良い形に変形できる：

$$\langle A(t)B\rangle_{\text{eq}} = \langle\mathbf{1}| \rho_{\text{eq}}^{\frac{1}{2}} A^z \mathrm{e}^{t\mathscr{L}(\beta)} B^z \rho_{\text{eq}}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{1}\rangle = \langle\mathbf{O}| A^z \mathrm{e}^{t\mathscr{L}(\beta)} B^z |\mathbf{O}\rangle. \tag{13.17}$$

ただし，**有限温度の真空状態** $|\mathbf{O}\rangle$ を次式で定義する[6]：

$$|\mathbf{O}\rangle = \rho_{\text{eq}}^{\frac{1}{2}} |\mathbf{1}\rangle. \tag{13.18}$$

また，**温度に依存する時間発展演算子** $\mathscr{L}(\beta)$ は

$$\mathscr{L}(\beta) = \rho_{\text{eq}}^{-\frac{1}{2}} \mathscr{L} \rho_{\text{eq}}^{\frac{1}{2}} \tag{13.19}$$

で定義される．さらに，時間発展演算子 $\mathscr{L}$ の定義式 (13.12) より，$\mathscr{L}(\beta)|\mathbf{O}\rangle = 0$ である．よって，$\langle\mathbf{O}|\mathrm{e}^{-t\mathscr{L}(\beta)} = \langle\mathbf{O}|$ が成り立つ．こうして，時間相関関数 $\langle A(t)B\rangle_{\text{eq}}$ は，次のような**有限温度の真空期待値**

$$\langle A(t)B\rangle_{\text{eq}} = \langle\mathbf{O}| A^z(t) B^z |\mathbf{O}\rangle; \ A^z(t) = \mathrm{e}^{-t\mathscr{L}(\beta)} A^z \mathrm{e}^{t\mathscr{L}(\beta)}. \tag{13.20}$$

で表されることになり便利である．これが厳密に求まるかどうかは，式 (13.20) からわかる通り，$\mathscr{L}(\beta)$ の**対角化可能性**にかかっている．

多くの読者はすでにお気づきと思うが，この定式化は，**量子熱場ダイナミクス**[1,10,11]の古典版（雛形）になっていた．この**古典熱場ダイナミクス**では，途中の表式には $\{\sigma_j^x\}$ のような非対角要素を持つ行列が現れるが，最終的には対角成分だけの行列の計算に帰着する．したがって，量子熱場ダイナミクスで導入されたダミーのチルダ空間[1,10]（すなわち，ゴーストスピン空間[12]）などは必要なく，実スピン空間のみを用いた有限温度の真空状態の期待値として物理量が求められる．当然のことではあるが，熱平衡状態の期待値 $\langle A\rangle_{\text{eq}}$ は

$$\langle A\rangle_{\text{eq}} = \langle\mathbf{O}| A^z |\mathbf{O}\rangle \tag{13.21}$$

と表される．

13.2 グラウバーの動的イジング模型の可解性

1 次元グラウバー模型[4,5]は拡張された 1 次元 XY 模型[9]と等価になり，可解系であることをまず示そう[6]．そのダイナミクスの遷移確率 $W_j(S_j)$ は式 (13.7) で与えられ，ハミルトニアン $\mathscr{H}$ は式 (13.14) で表されるので，式 (13.19) で定義される**温度に依存する時間発展演算子** $\mathscr{L}(\beta)$ は

$$\mathscr{L}(\beta) = \frac{\alpha}{2}\sum_{j=1}^{N}\left\{\frac{\gamma}{2}\left(\frac{1}{a} - a\sigma_{j-1}^{z}\sigma_{j+1}^{z}\right)\sigma_j^x - \left[1 - \frac{\gamma}{2}\sigma_j^z\left(\sigma_{j-1}^z + \sigma_{j+1}^z\right)\right]\right\} \tag{13.22}$$

と求められる[6]．ただし，$a = \tanh(\beta J)$ および $\gamma = \tanh(2\beta J)$ である．これは，明らかに，エルミート演算子であり，固有値はすべて実数である．実際に，これは厳密に対角化できる演算子である．このままではわかりにくいので，スピン空間の回転を行って，$\sigma_j^x \to \sigma_j^z$, $\sigma_j^z \to \sigma_j^y$, $\sigma_j^y \to \sigma_j^x$ と表示を変えると，式 (13.22) は

$$\hat{\mathscr{L}}(\beta) = \frac{\alpha}{2}\sum_{j=1}^{N}\left(\gamma\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y - \frac{a\gamma}{2}\sigma_{j-1}^y\sigma_j^z\sigma_{j+1}^y + \frac{\gamma}{2a}\sigma_j^z - 1\right) \tag{13.23}$$

と変換される．これは，相互作用 $\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x$ のない異方的な XY 模型に 3 体力 $\sigma_{j-1}^y\sigma_j^z\sigma_{j+1}^y$ の追加された，筆者[9]が 1971 年に導入した**一般化された XY 模型**になっており，可解系である．したがって，1 次元グラウバー模型は可解である．

次節で，この一般化された XY 模型[13~18]（最近，量子計算の模型としても盛んに用いられるようになったクラスター模型）の可解性について説明する．

13.3 一般化された XY 模型（クラスター模型）の可解性

1971 年筆者[9]は 2 次元イジング模型（古典系）と 1 次元 XY 模型（量子系）とが等価であることを示し，具体的に両者の相互作用の間の関係式を導き，それに基づき両系の相関関数の間の関係式を導いた．それまで，これらの系は別々に詳しく研究されていたが，この発見によって両者は統一的に扱われるようになった[9,18]．この等価性の発見は，後に ST 変換による一般の d **次元量子（スピン）系と** $(d+1)$ **次元古典系との等価性**へと発展し[19,20]，それはさらに**量子モンテカルロ法**の数理的基礎となった[19,20]．

さて，次のように一般化された XY 模型を考える[9]：

$$\mathscr{H}_{\mathrm{XY}}^{(m)} = -\sum_{k=1}^{m}\sum_{j=1}^{M}\left(J_k^x\sigma_j^x\sigma_{j+k}^x + J_k^y\sigma_j^y\sigma_{j+k}^y\right)\sigma_{j+1}^z\cdots\sigma_{j+k-1}^z + \mu_{\mathrm{B}}H\sum_j\sigma_j^z. \tag{13.24}$$

この系は，任意の自然数 m に対して，可解であることが次のジョルダン (Jordan)・ウィグナー (Wigner) 変換を用いて容易に示せる[9)]：

$$\sigma_n^z = 2C_n^\dagger C_n - 1,\quad \sigma_n^\pm = \frac{1}{2}\left(\sigma_n^x \pm \mathrm{i}\sigma_n^y\right),\quad \sigma_n^- = \exp\left(\mathrm{i}\pi\sum_{j=1}^{n-1} C_j^\dagger C_j\right) C_n,$$

$$\sigma_n^+ = \exp\left(\mathrm{i}\pi\sum_{j=1}^{n-1} C_j^\dagger C_j\right) C_n^\dagger;\ C_n^\dagger \text{ および } C_n \text{はフェルミ演算子.} \quad (13.25)$$

この変換を用いると次の公式が成り立つ[9)]：

$$\begin{aligned} \sigma_j^+\sigma_{j+1}^z\cdots\sigma_{j+k-1}^z\sigma_{j+k}^- &= (-1)^k C_j^\dagger C_{j+k}, \\ \sigma_j^+\sigma_{j+1}^z\cdots\sigma_{j+k-1}^z\sigma_{j+k}^+ &= (-1)^k C_j^\dagger C_{j+k}^\dagger. \end{aligned} \quad (13.26)$$

この公式を用いると，次の関係式が求まる：

$$\begin{aligned} \sigma_j^x\sigma_{j+1}^z\cdots\sigma_{j+k-1}^z a_{j+k}^x &= (-1)^k (C_j^\dagger C_{j+k} + C_{j+k}^\dagger C_j + C_j^\dagger C_{j+k}^\dagger + C_{j+k}C_j), \\ \sigma_j^y\sigma_{j+1}^z\cdots\sigma_{j+k-1}^z\sigma_{j+k}^x &= (-1)^k (C_j^\dagger C_{j+k} + C_{j+k}^\dagger C_j - C_j^\dagger C_{j+k}^\dagger - C_{j+k}C_j). \end{aligned} \quad (13.27)$$

こうして，m 次の一般化された **XY 模型（クラスター模型）は，フェルミ演算子の 2 次形式に変換され，可解系であることが**示される[9)]．この定理を一般の動的イジング模型に応用すると，無数の可解ダイナミクスのクラスが求まる．これを次節で説明する．

13.4 n-クラスターフリップの 1 次元動的イジング模型の可解性

前々節のグラウバー模型を拡張して，1 次元イジング模型で互いに連結した n 個のスピンを同時に反転させるダイナミクスを考える．この系の古典的なマスター方程式は，式 (13.12) の $\mathscr{L}$ を拡張して，

$$\Gamma^{(m)} = \sum_{j=1}^{N}\left(\mathscr{P}_j\mathscr{P}_{j+1}\cdots\mathscr{P}_{j+m-1} - 1\right) W_j^{(m)}\left(S_j, S_{j+m-1}\right) \quad (13.28)$$

と書ける．ただし，遷移確率 $W_j^{(m)}\left(S_j, S_{j+m-1}\right)$ は

$$W_j^{(m)}\left(S_j, S_{j+m-1}\right) = \frac{\alpha}{2}\left[1 - \frac{\gamma}{2}\left(S_{j-1}S_j + S_{j+m-1}S_{j+m}\right)\right] \quad (13.29)$$

である．これを前と同様に量子系の時間発展演算子 $\mathscr{L}^{(m)}$ に変換すると

$$\mathscr{L}^{(m)} = \sum_{j=1}^{N}(\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x\cdots\sigma_{j+m-1}^x - 1) W_j^{(m)}(\sigma_j^z, \sigma_{j+m-1}^z) \quad (13.30)$$

となる．さらに，変換 (13.19) を行って得られる $\mathscr{L}^{(m)}(\beta)$ は，スピンの回転

をした表示では，前節で導入した**一般化されたXY模型**（クラスター模型）のクラス[9] に入ることが容易にわかる[6,7]．こうして，n-クラスターフリップの**1次元動的イジング模型はすべて厳密に解ける**ことになる[6,7]．

前々節で導入した一般化されたXY模型の他にも可解な量子スピン系は多数ある[18]が，上の変換の逆変換

$$\mathscr{L}(\beta) \to \mathscr{L} \to \Gamma \tag{13.31}$$

を行って，可解な動的イジングスピン系を見つけることができる．今後いろいろな応用が期待される．

13.5 3次元クラスターイジング（吹き抜け）模型の厳密解とその物理的特徴

本節では，今から約半世紀前に筆者[21]の導入した3次元クラスターイジング模型，いわゆる「**吹き抜け模型**」とその最近の発展について解説する．

図13.1のように，3次元立方格子点 $\boldsymbol{r} = (i, j, k)$ 上にイジングスピン $\{S_{\boldsymbol{r}}\}$ が存在し，立方格子の側面にのみ4体力 $-J_{プラケット}S_{\boldsymbol{r}_1}S_{\boldsymbol{r}_2}S_{\boldsymbol{r}_3}S_{\boldsymbol{r}_4}$ が働く模型を考える．ハミルトニアンで書くと，次のようになる：

$$\mathscr{H}_0 = -\sum_{側面プラケット} J_{プラケット}S_{\boldsymbol{r}_1}S_{\boldsymbol{r}_2}S_{\boldsymbol{r}_3}S_{\boldsymbol{r}_4}. \tag{13.32}$$

この模型では，水平面上のプラケット（4格子点）の相互作用がないため，**多数の対称性**が存在する．すなわち，縦方向の任意の軸上のスピン $S_{\boldsymbol{r}}$ を一斉に符号を変えても，すなわち，$\{-S_{\boldsymbol{r}}\}$ にしても，$\mathscr{H}_0$ は不変である．この変換は独立に行うことができるので，その組み合わせの数だけ多数の対称性が存在する．この対称性を表現する次の $\sigma\tau$ **変換** を導入する[21]：任意の一つの軸上のスピン列 $\{\sigma_k\}$，すなわち，$\{\sigma_k \equiv S_{i,j,k}\}$ を用いて定義される変換

$$\sigma_k = \tau_1\tau_2\cdots\tau_k,\ 逆に,\ \tau_1 = \sigma_1, \tau_2 = \sigma_1\sigma_2, \cdots, \tau_j = \sigma_{j-1}\sigma_j, \cdots \tag{13.33}$$

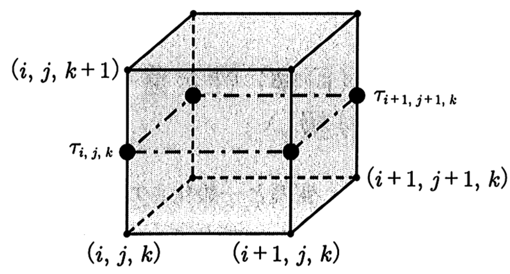


図13.1　fukinuke模型の相互作用．壁4面にのみ4体力 $-J_{ijkl}S_iS_jS_kS_l$ が働く．水平面内には相互作用が働かない．「吹き抜け建築」に因んで「fukinuke model」と名づけた[21]．$\sigma\tau$ 変換後は，独立な2次元のイジング模型となる．

を**古典 $\sigma\tau$ 変換**と呼ぶことにする（後で触れる量子 $\sigma\tau$ 変換は一般化された XY 模型の可解性の議論に有効である）．この変換を用いると，4 体力は τ 変数の 2 体力に変換され，ハミルトニアン (13.32) は独立な 2 次元イジング模型のハミルトニアンの和に変換される：

$$\hat{\mathscr{H}}_0 = \sum_{k=2} \mathscr{H}_k^{(2)};\ \mathscr{H}_k^{(2)} = -J_k \sum_{\langle i,j \rangle} \tau_{i,j,k}\tau_{i+1,j,k} - J'_k \sum_{\langle i,j \rangle} \tau_{i,j,k}\tau_{i,j+1,k} \tag{13.34}$$

こうして，**3 次元クラスターイジング模型すなわち吹き抜け模型は厳密に解けて，その比熱は転移点で対数的発散を示す**．しかも，上の $\sigma\tau$ 変換からわかる通り，次のようにいくつもの**特異な物理的振舞い**を示すことがわかる[21]．

(a)　すべての温度領域で自発磁化は存在しない；$\langle S_{i,j,k} \rangle \equiv 0$.

(b)　磁場 H に対する磁化率は転移点でも発散しない．
　これは，ハミルトニアン (13.32) にゼーマン項 $-\mu_{\mathrm{B}} \sum_{\boldsymbol{r}} S_{\boldsymbol{r}}$ をつけ加えて，磁化率 χ_0 の表式を求めると，容易にわかる．

(c)　非線形磁化率が転移点で発散する[22]．
　それは，τ スピンの相関関数で表されるからである．

(d)　水平面ごとの相互関数 J_k が異なれば，J_k ごとに多数の相転移点が現れることになる．

(e)　τ スピン（S スピンのダイポール）が面ごとに磁化し，基底状態は無数に縮退している．

これらの特異な物理的振舞いは，1975 年にエドワードとアンダーソン[22, 23]によって提案されたランダムスピン系におけるスピングラスの特異な振舞いを，後になって思えば，彷彿とさせる．

最近，このクラスターイジング模型は規則的な相互作用の系における**ランダム秩序相（ROP）**の出現の例として大変興味を持たれ研究されつつある[24~27]．また，素粒子における弦理論に関連して，これら 4 体力模型は再発見され，盛んに研究されつつある[13~16]．特に文献 25) では，この問題に関する過去約 50 年間にわたる研究が丁寧に解説されており大変参考になる．

13.6　古典（可換）性と量子（非可換）性の狭間で揺れる現象の取り扱い

(i) 量子 $\sigma\tau$ 変換と一般化された XY 模型（クラスター模型）

第 13.3 節では，一般化された XY 模型が可解であることをジョルダン・ウィグナー変換を用いて示した．ここでは，次の**量子 $\sigma\tau$ 変換**

$$\tau_j^x = f_j\left(\{\sigma_k^x, \sigma_k^y, \sigma_k^z\}\right), \quad \tau_j^y = g_j\left(\{\boldsymbol{\sigma}\}\right), \quad \tau_j^z = h_j\left(\{\boldsymbol{\sigma}\}\right) \tag{13.35}$$

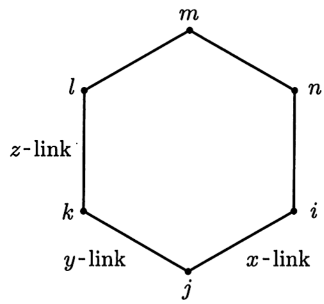


図 13.2　蜂の巣格子上での異方的相互作用．x-link では $-J_x\sigma_i^x\sigma_j^x$，y-link では $-J_y\sigma_j^y\sigma k^y$，z-link では $-J_z\sigma_k^z\sigma_l^z$ の相互作用である（**キタエフ模型**）．

を考える[6)]．ここで，f_j, g_j, h_j はパウリ σ スピンの積にとり，τ スピンもパウリスピンになるようにする．逆変換

$$\sigma_j^x = H_j\left(\{\tau_k^x, \tau_k^y, \tau_k^z\}\right), \quad \sigma_j^y = G_j\left(\{\boldsymbol{\tau}\}\right), \quad \sigma_j^z = H_j\left(\{\boldsymbol{\tau}\}\right) \qquad (13.36)$$

を用いて，与えられた σ スピンのハミルトニアン $\mathscr{H}\left(\{\boldsymbol{\sigma}\}\right)$ を τ スピンのハミルトニアン $\hat{\mathscr{H}}\left(\{\boldsymbol{\tau}\}\right)$ に変換して，その可解性を調べると大変便利である[6, 28)]．ただし，これらの変換の種類は無数にあり，具体的な式は複雑になる[6, 28)]のでここでは省略する．

(ii) キタエフ（A. Kitaev）模型

キタエフ[29)]は，図 13.2 に示すような，磁性体の模型としては極めて特異的であるが，情報理論や数理物理学としては興味深い模型を導入した．これは最近大変流行している[18, 30)]．その理由の一つは，これは**ジョルダン・ウィグナー変換**によって**自由フェルミオン系**に変換され可解であることである．また，局所的な運動の定数が各プラケットごとに存在することもこの模型の特徴の一つである．すなわち，次のプラケット（クラスター）演算子

$$W_{ijklmn} = \sigma_k^x\sigma_l^y\sigma_m^z\sigma_n^x\sigma_i^y\sigma_j^z \qquad (13.37)$$

はすべて，キタエフハミルトニアン

$$\mathscr{H}_{\mathrm{Kitaev}} = -\sum_{x\text{-link}}\sigma_i^x\sigma_j^x - \sum_{y\text{-link}}\sigma_j^y\sigma_k^y - \sum_{z\text{-link}}\sigma_k^z\sigma_l^z \qquad (13.38)$$

と可換である．

このように，局所的な演算子が運動の定数になるという性質は，イジング模型で顕著にみられること（イジング模型ではすべて局所的演算子が可換）であり，部分的に「古典（可換）性」を表している．グローバルには量子（非可換）性も保持しており，言うならば，この模型ではそれら両者の狭間で揺れる現象が現れるため，キタエフ模型は量子情報の分野で重要な役割を果すのであろう．

(iii) 因子化（行列積）基底状態出現の‘最初の系’—XY 模型の「自然境界」の発見

第 3 章で，ST 変換を用いて d 次元量子スピン系を $(d+1)$ 次元古典系（イジング模型）に変換することにより，モンテカルロ法のような古典系で開発された方法が量子系にも応用できることを示した（**量子モンテカルロ法**の提唱[19]）．第 13.3 節でも少しふれた通り，歴史的には，1 次元 XY 模型のハミルトニアン

$$\mathscr{H}^{\mathrm{XY}} = -\sum_j \left(J_x\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + J_y\sigma_j^y\sigma_{j+1}^y - \mu_{\mathrm{B}}H\sigma_j^z\right) \tag{13.39}$$

と 2 次元イジング模型

$$\mathscr{H}^{\mathrm{I}} = -J_1\sum \sigma_{n,m}^x\sigma_{n+1,m}^x - J_2\sum \sigma_{n,m}^x\sigma_{n,m+1}^x \tag{13.40}$$

の輸送行列 $V = V_1^{\frac{1}{2}}V_2V_1^{\frac{1}{2}}$ が関係式

$$\frac{J_y}{J_x} = \tanh^2 K_1^* \quad \text{および} \quad \frac{\mu_{\mathrm{B}}H}{J_x} = 2\tanh K_1^*\coth 2K_2 \tag{13.41}$$

の下で可換になる（$[\mathscr{H}^{\mathrm{XY}}, V] = 0$）という発見[9]から，量子スピン系と古典系（イジング系）との対応関係が議論され，応用されるようになった[18,30,31]．ただし，

$$\begin{cases} V_1 = (2\sinh 2K_1)^{\frac{M}{2}}\exp\left(-K_1^*\displaystyle\sum_j^M \sigma_j^x\right);\ K_i = \dfrac{J_i}{k_{\mathrm{B}}T}, \\ V_2 = \exp\left(K_2\displaystyle\sum_j^M \sigma_j^x\sigma_{j+1}^x\right),\ \tanh K_1^* \equiv \exp\left(-2K_1\right), \end{cases} \tag{13.42}$$

および，M はイジング系のサイズを表す．

この等価性の定理より，XY 模型の基底状態と 2 次元イジング模型の転送行列の最大固有値に対応する状態とが共通になることがわかる．しかし，パラメータ (J_x, J_y, H) と (J_1, J_2) とが互いに実数の範囲で対応するためには制限がある．今，$J_{x,y} = J(1\pm\gamma)$，および $h = \mu_{\mathrm{B}}H/J$ とおくと，その条件は

$$\cosh 2K_1^* = \frac{1}{\gamma} \quad \text{および} \quad \tanh 2K_1 = \frac{(1-\gamma^2)^{\frac{1}{2}}}{h} \tag{13.43}$$

より，$h^2+\gamma^2 \geq 1$ となる．この h-γ 平面の内側では，XY 模型のスピン相関は振動的な（真に量子的な）振舞いをする[9]．円の外側では，それは単調な（古典的な）振舞いをする．この境界を「**自然境界**」と名づけた[9]．この自然境界上での XY 模型の因子化された基底状態は，トポロジカル秩序[32,33]に関連して最近研究されつつある[34]．

この「自然境界」は，正に「古典的振舞い」と「量子的振舞い」の境目を与えるものであり，大変興味深い．ハルディーン予想[32~35]もこの量子・古典境界性（因子化可能性）の視点から論じることも参考になるであろう．すなわち，

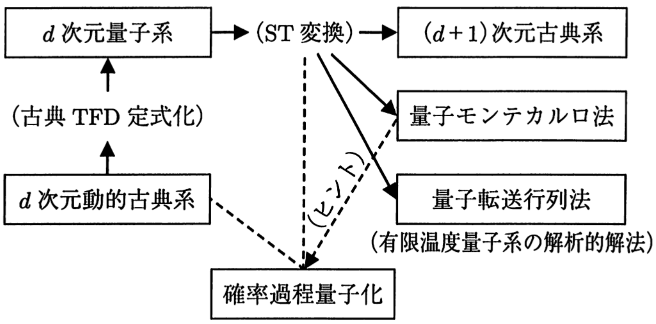


図 13.3　本書の主なテーマ間の相互関係図.

スピンが半奇数の系と比べて，スピンが整数の系は，各格子点のスピン S_j^z の固有値が零の状態が含まれるため，量子性（RVB 的状態）が弱くなって励起状態にギャップが現れると考えられる[36].

13.7　おわりに

本書の主なテーマの間の相互関係を示すと，図 13.3 のようになる.

まだまだ議論したいテーマは多数ある．例えば，次のようなものである.

(a)　テンソルネットワーク表現と合流型転送行列法[37]との同等性.

(b)　量子モンテカルロ法の「負符号問題」[20]の解消法.

この難問は本質的にフラストレートしたスピン系などで現れる．そこで，そうした系を ST 変換し，得られるフラストレートしたイジングスピン系をさらに双対変換し，虚数磁場[38] の系（フラストレーションが緩和された系）を求め，これをモンテカルロ法でシミュレートするという新しい方法を発見した[36].

(c)　**確率過程量子化法**[39].

(d)　非線形拡散方程式（**KPZ 方程式**など）の可解性[40].

(e)　2 次元動的イジング模型の可解性の程度.

この問題は，今までの「量子古典対応」，および「動的古典量子対応」の議論からわかる通り，2 次元量子系の可解性，すなわち，3 次元イジング模型の可解性と同程度の困難さを伴う極めて挑戦的な課題の一つである[41].

これらのテーマについては，別の機会に議論したい.

物理に終りはない[41].

参考文献

1)　鈴木増雄,『統計力学』(岩波書店, 2000), 岩波オンデマンドブックス (2016 年 1 月).

2)　N.G. van Kampen, *Stochastic Processes in Physics and Chemistry* (North Holland,

1981).
3) M. Katori, *Bessel Processes, Schram-Loewner Evolution, and the Dyson Model* (Springer, 2015).
4) R.J. Glauber, *J. Math. Phys.* **4**, 294 (1963).
5) M. Suzuki and R. Kubo, *J. Phys. Soc. Jpn.* **24**, 51 (1968). この論文では，確率過程における散逸揺動定理が一般的に導かれている．
6) B.U. Felderhoff and M. Suzuki, *Physica* **56**, 43 (1971).
7) H.J. Hilhorst, M. Suzuki, and B.U. Felderhoff, *Physica* **60**, 199 (1972).
8) M. Suzuki, *Phys. Lett. A***34**, 94 (1971).
9) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **46**, 1337 (1971).
10) Y. Takahashi and H. Umezawa, *Collect. Phenom.* **2**, 55 (1975).
11) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **54**, 4483 (1985).
12) M. Suzuki, *Phys. Lett.* **18**, 233 (1965).
13) S.O. Skrøvseth and S.D. Bartlett, *Phys. Rev. A***80**, 022316 (2009).
14) P. Smacchia, *et al.*, *Phys. Rev. A***84**, 022304 (2001).
15) R. Jafari and S. Mahdavifar, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **2014**, 043102 (2014).
16) T. Ohta, *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.* **84**, 063001 (2015).
17) K. Minami, *J. Phys. Soc. Jpn.* **85**, 024003 (2016).
18) 南和彦，『格子模型の数理物理—Free fermion 系，Bethe 仮説，Yang–Baxter 方程式，量子群』臨時別冊・数理科学 SGC ライブラリ-108（サイエンス社，2014）．
19) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **56**, 1454 (1976).
20) M. Suzuki, ed.: *Quantum Monte Carlo Methods in Equilibrium and Nonequilibrium Systems*, Springer-Verlag (1987).
21) M. Suzuki, *Phys. Rev. Lett.* **28**, 507 (1972). この論文で「fukinuke model」を提唱した．
22) M. Suzuki, *Prog. Theor. Phys.* **58**, 1151 (1977). この論文では，スピングラスの現象論を提案し，非線形磁化率がスピングラス転移点で負に発散することを示した．
23) S.F. Edwards and P.W. Anderson, *J. Phys. F: Metal Phys.* **5**, 965 (1975).
24) Y. Hashizume and M. Suzuki, *Int. J. Mod. Phys. B***25**, 73 (2011), ibid. *B***26**, 3529 (2011).
25) D.A. Johnston, *J. Phys. A: Math. Theor.* **45**, 405001 (2012).
26) Y. Hashizume, M. Suzuki and S. Okamura, *Physica A***403**, 217 (2014).
27) C. Castelnovo, C. Chamon and D. Sherrington, *Phys. Rev. B***81**, 184303 (2010).
28) K. Minami, *J. Phys. Soc. Jpn.* (in press).
29) A. Kitaev, *Ann. Phys.* **321**, 2 (2006).
30) 松枝宏明，『量子系のエンタングルメントと幾何学』（森北出版，2016）．J. Nasu, M. Udagawa and Y. Motome, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 197205 (2014) および前刷．
31) S. Suzuki, J. Inoue and B.K. Chakrabarti, *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models* (Second Edittion, Springer-Verlag Berlin Heidelberg 1996, 2013).
32) I. Affleck, T. Kennedy, E.H. Lieb and H. Tasaki, *Phys. Rev. Lett.* **59**, 799 (1987).
33) 押川正毅，「物性研だより」第 56 巻第 3 号（2017）．
34) J. Abouie and R. Sepehrinia, *Europhys. Lett.* **113**, 37005 (2016).
35) F.D.M. Haldane, *Phys. Lett. A***93**, 464 (1983).
36) M. Suzuki, *Proc. Japan Acad. Ser. B*, 準備中．
37) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **58**, 3642 (1989).
38) M. Suzuki, *J. Phys. Soc. Jpn.* **60**, 441 (1991).
39) 第 1 章の文献 20, 21)．このパリジ（G. Parisi）とウー（Y.S. Wu）の方法は，第 1 章でもふれた通り，ST 変換で量子スピン系を古典系に変換してシミュレートする量子モンテカルロ法のアイデアに基づくものである．
40) T. Sasamoto and H. Spohn, *Nucl. Phys. B***834**, 523 (2010).
41) M. Suzuki and R. Kubo (Eds.), *Evolutionary Trends in the Physical Sciences* (Springer-Verlag, New York Berling Heidelberg, 1991). 特に，R. Peierls の “Does Physics Ever Come to an End?” という題の仁科芳雄生誕百周年記念講演録参照．

索　引

欧字

ア

カ

サ

タ

ナ

ハ

マ

ヤ

ラ

著 者 略 歴

鈴木 増雄
すずき ますお

1966 年　東京大学数物系大学院博士課程修了　理学博士
1966 年　東京大学理学部助手
1968 年　東京大学物性研究所助教授
1973 年　東京大学理学部助教授
1983 年　東京大学理学部教授
1986 年–1990 年　文部省科学官
1996 年　仁科財団常務理事
1997 年　東京理科大学理学部教授，東京大学名誉教授
2000 年–2001 年　日本物理学会会長
2012 年　理化学研究所客員研究員
専　門　統計物理学，数理物理学
主要著書
『統計力学』岩波書店，2000，岩波オンデマンドブックス，2016 年.
『変分原理と物理学』丸善出版，2015.

臨時別冊・数理科学 SGC ライブラリ - 137
『経路積分と量子解析　量子古典対応から量子現象に迫る』
著　者　鈴木 増雄
2017 年 11 月 25 日　初版発行

数 理 科 学 編 集 部　　　　発行人 森 平 敏 孝
TEL. (03) 5474–8816
FAX. (03) 5474–8817

ホームページ　http://www.saiensu.co.jp
ご意見・ご要望は　sk@saiensu.co.jp まで.　　　　表紙デザイン：長谷部貴志

発行所 © 株式会社 **サイエンス社**　　TEL. (03) 5474–8500 (代表)
〒151–0051　東京都渋谷区千駄ヶ谷 1–3–25　振替 00170–7–2387　(03) 5474–8600 (広告部)

印刷・製本　三美印刷株式会社　山岡景仁